

Modellierung oberflächengekoppelter Mehrfeldsysteme und numerische Analyse rutschender Bodenmaterialien

Frithjof Hagen Pasenow

**Institut für Statik
Technische Universität Braunschweig**

Bericht Nr. 2014-116



Modellierung oberflächengekoppelter Mehrfeldsysteme und numerische Analyse rutschender Bodenmaterialien

Von der Fakultät

Architektur, Bauingenieurwesen und Umweltwissenschaften
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig
zur Erlangung des Grades eines Doktoringenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Ing. Frithjof Hagen Pasenow
aus Rostock

Eingereicht am

25. März 2013

Mündliche Prüfung am

31. Januar 2014

Berichter

Prof. Dr.-Ing. Dieter Dinkler

Prof. Dr.-Ing. Andreas Zilian

Prüfer

Prof. Dr.-Ing. Laura De Lorenzis

Braunschweig 2014

ISBN 978-3-926031-17-4

Herausgeber: Prof. Dr.-Ing. Dieter Dinkler

© Institut für Statik, Technische Universität Braunschweig, 2014

Kurzfassung

Der Wandel des Klimas wird mit einer Zunahme signifikanter Hangrutschungen einhergehen, mit den daraus resultierenden Risiken für Menschenleben und Sachwerte. Der Entwicklung leistungsfähiger Modelle zur Untersuchung der Initiierung von Rutschungen und für die Prognose der Bewegung von Rutschmassen kommt damit zukünftig große Bedeutung zu.

In dieser Arbeit ist eine Methodik zur numerischen Analyse von Hangrutschungen unter großen Verformungen und bei wesentlichen topologischen Änderungen vorgestellt. Dafür ist ein einheitliches Modell zur Beschreibung rutschender granularer Bodenmaterialien und umgebender fluider Medien im Rahmen oberflächengekoppelter Mehrfeldsysteme gewählt. Die Beschreibung der betrachteten Prozesse erfolgt mit den Modellgleichungen der Kontinuumsmechanik, die aufgrund großer Deformationen rutschender Böden für alle Materialien in Euler'scher Betrachtungsweise formuliert sind. Das Materialverhalten der anstehenden Fluide Luft und Wasser ist als inkompressibel angenommen und mit linear-viskosen Newton'schen Fluidmodellen erfasst. Für die Beschreibung granularer Bodenmaterialien sind verschiedene Formulierungen getestet. Auf Grundlage einer Fluidformulierung ist der fließende Boden als inkompressibles viskoplastisches Herschel-Bulkley-Fluid modelliert und auf Grundlage einer Feststoffformulierung als kompressibles elasto-viskoplastisches Material mit modifizierter Drucker-Prager-Fließbedingung. Die Erfassung der Bewegung von Teilkontinua-Grenzflächen erfolgt unter Zuhilfenahme vorzeichenbehafteter Abstandsfunktionen mit der Level-Set-Methodik, welche Vorteile bei der Erfassung signifikanter Gestalt- und Topologieänderungen von Teilkontinua und Grenzflächen sowie bei der Ermittlung von Grenzflächengeometrieinformationen aufweist. Die nichtlinearen Modellgleichungen sind unter Verwendung zeitdiskontinuierlicher Galerkin-Verfahren und von Petrov-Galerkin-Stabilisierungen mit der Raum-Zeit-Finite-Element-Methode diskretisiert und im Rahmen eines Picard-Iterationsschemas numerisch gelöst.

Mit grenzflächenseitig unterschiedlichen Materialien sowie aufgabenspezifisch zu berücksichtigenden Quelltermen auf Grenzflächen, treten unstetige Lösungsverläufe in Form von starken und schwachen Diskontinuitäten auf. Zu deren Erfassung werden die Ansatzräume der die Grenzfläche beherbergenden Elemente im Rahmen der erweiterten Finite-Element-Methode (XFEM) um Ansätze zur Beschreibung von Lösungsunstetigkeiten erweitert. Die Konstruktion der dafür verwendeten Anreicherungsfunktionen ist im Allgemeinen mit Signumfunktionen der Level-Set-Lösung realisiert. Starke Unstetigkeiten sind so in natürlicher Weise erfasst, während schwach unstetige Lösungsverläufe mit Nitsche's Methode bzw. lokal gemischt-hybriden Methoden erzwungen werden. In beiden Fällen werden zur Erfassung unstetiger Lösungsverläufe keine zusätzlichen Freiwerte eingeführt. Die Stabilität des Verfahrens erfordert jedoch die Hinzunahme eines Penalty-Terms.

Ausgewählte akademische Beispiele dienen der Verifikation der eingesetzten Submodelle zur Erfassung von Grenzflächengeometrieeigenschaften und unstetiger Lösungsverläufe. Die grundsätzlichen Möglichkeiten des Gesamtmodells sind anhand der Rutschung verschiedener Modellhänge in Interaktion mit den anstehenden Fluiden Luft und Wasser bei der Entstehung von Impulswellen demonstriert.

Abstract

Climatic changes will be accompanied by an increase of significant landslides causing increased threat to human lives and material values. Therefore, future developments of efficient numerical models for the analysis of initial landslide processes and the prediction of landslide motions are of great importance.

This work introduces a methodology for numerical analysis of landslides experiencing considerable deformations and topological changes. For this purpose sliding granular soil materials and surrounding fluids are uniformly described within a boundary-coupled multi-field system approach. For all materials the description of considered processes is carried out with the model equations of continuum mechanics which are formulated in an Eulerian frame of reference due to significant deformations of sliding soils. Material behavior of the present fluids air and water is modeled as incompressible, governed by a linear-viscous Newtonian material law. For the behavior of granular soil materials several formulations are tested. Fluid-like behavior is modeled with an incompressible viscoplastic Herschel-Bulkley material and solid-like behavior is modeled with a compressible elastic-viscoplastic material using a modified Drucker-Prager yield function. Within an interface capturing approach, all material interfaces are implicitly described by specifically defined signed distant-functions within the level-set-methodology which is offering advantages describing arbitrarily evolving complex topologies and determining interfacial geometry properties. The nonlinear model equations are discretized with space-time finite elements using time-discontinuous Galerkin-methods and Petrov-Galerkin-stabilization techniques. Numerical solutions are obtained in a Picard iterative process.

With different materials on both sides of interfaces and in addition interfacial source terms for specific problems non-smooth solutions in terms of strong and weak discontinuities occur. In order to determine these discontinuities the ansatz spaces of elements intersected by interfaces are extended with discontinuous ansatz functions in the framework of extended finite-element-methods (XFEM). The construction of the commonly used enrichment functions is carried out with signum functions of the level-set solution. Therefore, strong discontinuities are determined naturally, while weak discontinuities are enforced with Nitsche's method or localized mixed-hybrid methods. In both cases discontinuous solutions can be determined without the need of supplementary variables. However, for stability reasons the method requires an additional penalty term.

In order to verificate the implemented submodels for the determination of geometrical interface properties and discontinuous solution characteristics selected academic examples are used. The general possibilities of the whole model are shown by means of sliding of different slope materials in interaction with the surrounding fluids air and water during the generation of impulse waves.

Inhalt

1. Einleitung	1
1.1 Motivation und Zielsetzung	1
1.2 Stand der Forschung	2
1.3 Ziel und Aufbau der Arbeit	6
2. Modellbildung	9
2.1 Kontinuumsmechanik	9
2.1.1 Kinematik	11
2.1.2 Spannungen	12
2.1.3 Bilanzgleichungen	13
2.1.4 Materialgleichungen	14
2.1.5 Rand- und Anfangsbedingungen	17
2.1.6 Übergangsbedingungen	18
2.2 Lösungsverfahren	20
2.2.1 Raum-Zeit-Finite-Element-Methode	21
2.2.2 Zeitdiskontinuierliches Galerkin-Verfahren	23
2.2.3 Ansätze im Element	24
2.2.4 Stabilisierung	25
3. Grenzflächendynamik	27
3.1 Anforderungen und Überblick	27
3.1.1 Explizite Verfahren	28
3.1.2 Implizite Verfahren	31
3.2 Level-Set-Methode	34
3.2.1 Eigenschaften	34
3.2.2 Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung	39
3.2.3 Geometrieinformationen	40
3.2.4 Erhaltungseigenschaften	42
3.3 Reinitialisierung	43
3.3.1 Einführung	43
3.3.2 Direkte Methode	46
3.3.3 Direkte Methode mit Volumenkorrektur	46
3.3.4 PDE-Ansatz	47
3.3.5 Lokale Grenzflächenprojektion	48

3.3.6	Fast-Marching-Methode	49
3.3.7	Vergleich verschiedener Nahbereichsreinitialisierungen	52
3.4	Ermittlung von Geometrieinformationen	56
3.4.1	Methoden zur Geometrieermittlung	57
3.4.2	Vergleich verschiedener Verfahren	59
4.	Unstetige Beschreibungsgrößen	65
4.1	Partition-of-Unity Konzept	66
4.2	Erweiterte Finite-Element-Methode	67
4.2.1	Konstruktion von Anreicherungsfunktionen	69
4.2.2	Blendelemente	71
4.2.3	Wahl der Anreicherungsfunktionen	74
4.3	Numerische Integration unstetiger Ansätze	77
5.	Zwei-Fluid-Strömungen	79
5.1	Strömungscharakterisierung	80
5.2	Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung gekoppelter viskoser Fluide	81
5.2.1	Einbringen der Materialgleichung	82
5.2.2	Einbringen von Übergangsbedingungen	83
5.2.3	Laplace-Beltrami-Formulierung	86
5.2.4	Lösungsstrategie für das gekoppelte Gesamtsystem	87
5.3	Stehende Kapillarwelle	89
5.4	Stationäre Schichtenströmung	93
5.5	Stehende Schwerewelle	99
6.	Feststoffe	103
6.1	Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung für elastische Materialien	104
6.1.1	Ablösen der Spannungsfreiwerte	106
6.1.2	Wahl der Spannungsansätze	107
6.1.3	Ermittlung von Spannungsgradienten	107
6.1.4	Erfassung veränderlicher Dichte	108
6.1.5	Lösungsstrategie für die gekoppelten Strukturgleichungen	110
6.2	Rotierende Kreisscheibe	111
6.3	Berücksichtigung plastischen Materialverhaltens	114
6.3.1	Iteration der viskoplastischen Anteile	117
6.3.2	Ebener Verzerrungszustand	118
6.3.3	Viskoplastisches Materialverhalten	119
6.4	Einbringen von Übergangsbedingungen	121
6.5	Fluid-Struktur-Kopplung	123
6.6	Schüttkegel	127

7. Drei-Fluid-Strömungen	131
7.1 Erweiterung der Zwei-Fluid-Formulierung auf drei Fluide	131
7.1.1 Definition der verwendeten Level-Set-Funktionen	133
7.1.2 Anreicherungskonzept	134
7.1.3 Erhaltung von Tripelpunkten	136
7.2 Struktur- und Gestaltänderung	137
7.3 Hangrutschung	140
8. Zusammenfassung	147
Literatur	149

1. Einleitung

1.1 Motivation und Zielsetzung

Gravitative Massenbewegungen von Bodenmaterialien stellen in Küsten-, Berg- und Vulkanregionen eine bedeutende Naturgefahr für Menschenleben und Sachwerte dar. Überseeische Hänge an den Ufern von Berg- und Stauseen, Meeresbuchten oder Fjorden können mit hoher Geschwindigkeit in darunter liegende Gewässer rutschen und enorme Wasserwellen mit signifikanten Auflauhöhen auslösen. Küstennahe unterseeische Hangrutschungen an Kontinentalthängen oder in Verlängerung von Flussdeltas sind eine mögliche Ursache für Tsunamis, wie z. B. die Storegga-Rutschungen vor Norwegen verdeutlichen [23]. Aber auch künstliche Materialanhäufungen wie Abraumhalden und Siedlungsabfalldeponien sind potentiell rutschgefährdet, besonders bei unsachgemäßer Einlagerung der Abfallstoffe.

Der von gravitativen Bodenbewegungen verursachte jährliche Verlust an Menschenleben und Sachwerten übersteigt in vielen Ländern oftmals den von sonstigen Naturkatastrophen hervorgerufenen Schaden. Als Beleg dafür seien die durch ein Erdbeben ausgelöste Schlamm- und Gerölllawine 1970 in Peru mit insgesamt ca. 48000 Todesopfern und der infolge eines Vulkanausbruches ausgelöste Lahar 1985 in Kolumbien mit mehr als 23000 Todesopfern genannt [54]. Darüber hinaus können Berg- und Hangrutschungen in Uferbereichen Wasserwellen mit enormen Wellen- und Auflauhöhen auslösen. Ein Extrembeispiel ist die Hangrutschung in der Lituya Bay 1958, die eine Wasserwelle mit einer Höhe von ca. 160 m und einer Auflauhöhe von 524 m im Nahbereich der Rutschung auslöste [50]. Die Gefahr dieser Naturereignisse für Menschenleben ist mit der Vajont-Katastrophe 1963 in den italienischen Alpen verdeutlicht, bei der ein Teil der durch einen Bergrutsch in einen Stausee verdrängten Wassermasse über die Stau-mauer schwappte, mehrere Dörfer vernichtete und mehr als 2000 Menschenleben forderte [84].

Die Ursachen gravitativer Massenbewegungen sind vielfältig: z. B. dynamische Einwirkungen wie Erdbeben und Vulkanausbrüche; Veränderungen der mechanischen Eigenschaften rutschgefährdeter Hänge durch anhaltende oder extreme Regen- und Schneefälle sowie Schneeschmelzen; Veränderung von Bodenstrukturen durch wind- und frostbedingte Erosion, abholzungsbedingtes Absterben von Wurzeln oder nachhaltige menschliche Eingriffe in natürliche Geosysteme, u. a. durch Straßeneinschnitte, Flussbegradigungen oder Stauseen. Gerade in Entwicklungsländern ist aufgrund der Bevölkerungsentwicklung und der ökonomischen Nutzbarmachung zahlreicher Naturlandschaften davon auszugehen, dass zunehmend neue rutschgefährdete Gebiete entstehen und besiedelt werden. Verschärfend kommen die Auswirkungen des Klimawandels hinzu. Die Zunahme schwerer Unwetter und langanhaltender Regenfälle und das Auftauen von Permafrostböden in Hochgebirgsregionen oder von stabilisierenden Methanhydraten in unterseeischen Kontinentalthängen bewirken die Zunahme signifikanter Rutschereignisse.

Der Entwicklung leistungsfähiger Modelle zur Untersuchung der Initiierung von Rutschungen und für die Prognose der Bewegung von Rutschmassen kommt damit zukünftig große Bedeutung zu. Die zu entwickelnden Modelle können zur Berechnung der Entstehung und der Auflaufhöhe von Impulswellen oder von Rutschausläuflängen rutschender Bodenmaterialien herangezogen werden. Mit geeigneten topographischen und Materialdaten der gefährdeten Gebiete können so z. B. Gefahrenkarten erstellt oder Schutzverbauungen wie Sperrbauwerke und Schutzdämme geplant werden.

1.2 Stand der Forschung

Eine Vielzahl natürlicher und künstlicher Rutschmaterialien besteht aus kleinen, in der Regel festen Partikeln (Körnern) makroskopischer Größe und zählt dementsprechend zu den granularen Materialien. Diese können infolge ihrer Struktur sowohl feststoffähnliches, Bild 1.1 a), als auch fluidähnliches, Bild 1.1 b), in der Regel ausgeprägt nichtlineares Materialverhalten aufweisen. Der nicht von den Körnern eingenommene Porenraum ist mit einem oder mehreren Fluiden belegt. Kornverteilung, Korngrößenunterschiede, Packungsdichte sowie die Wassersättigung des Porenraumes bestimmen die mechanischen Eigenschaften des granularen Bodenmaterials. Feste Bodenmaterialien sind durch elasto-viskoplastisches Materialverhalten gekennzeichnet. Rutschende Bodenmaterialien verhalten sich wie nicht-Newton'sche, viskoplastische Fluide, wenn intergranulare Kollisionen und Reibungskräfte dominieren. Überwiegen die Anteile des Porenwassers deutlich die Anteile der Feststoffphase, dann verhalten sich fließende Bodenmaterialien näherungsweise wie Newton'sche Fluide.

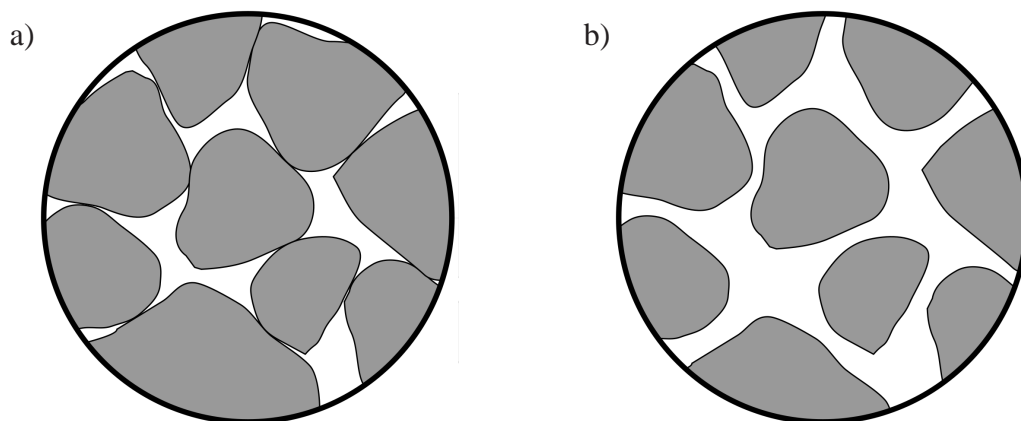


Bild 1.1: Phasenzustände granularer Materialien: a) feststoffähnlich, b) fluidähnlich.

Zur numerischen Beschreibung rutschender Bodenmaterialien sind unterschiedlich komplexe und der jeweiligen Aufgabenstellung angepasste Ansätze in der Literatur vorgestellt. Tiefengemittelte Modelle sowie Modellierungen im Rahmen der Kontinuumsmechanik werden in der Regel mit numerischen Standardverfahren wie Finite-Element-Methoden, Finite-Volumen-Methoden oder Finite-Differenzen-Verfahren diskretisiert. Diskrete Modelle hingegen behandeln die zu untersuchenden Strukturen als Ansammlung interagierender und durch externe Lasten beanspruchter starrer oder deformierbarer Einzelkörper. Aufgrund dieser Betrachtung sind diskrete Modelle insbesondere zur Simulation trockener granularer Medien geeignet. Nachfolgend sind tiefengemittelte, kontinuumsmechanische sowie diskrete Modelle näher erläutert.

Tiefengemittelte Modelle. Modelle mit tiefengemittelten Modellgleichungen sind mit vereinfachenden Annahmen bezüglich des physikalischen Verhaltens rutschender Bodenkörper formuliert und bieten daher signifikante Reduzierungen der Modellkomplexität und des numerischen Aufwandes. Anwendungsgrenzen erfahren tiefengemittelte Modelle, wenn Geschwindigkeiten und Beschleunigungen in Dickenrichtung oder eine Durchmischung des betrachteten Materials maßgeblich werden, wie z. B. beim Eintauchen schnell rutschender Bodenmaterialien in einen Wasserkörper [95, 96] oder bei abrupten Änderungen der Gleitflächentopographie.

Das grundlegende Modell zur Simulation der Bewegung kohäsionsloser, trockener, rutschender granularer Materialien auf rauen Oberflächen ist das Savage-Hutter-Modell [132]. Darin sind die plastischen Eigenschaften des inkompressiblen, fluidähnlichen Mediums mit einem Mohr-Coulomb-Fließkriterium beschrieben, während das Coulomb'sche Reibgesetz für die Gleitflächenreibung Anwendung findet. Das von Iverson [79] entwickelte Zwei-Konstituierenden-Modell basiert auf dem Savage-Hutter-Modell und berücksichtigt den Einfluss eines nichtviskosen Porenfluids im Rahmen der Mischungstheorie. Mit Annahme konstanter Porosität und vernachlässigter Differenz der Geschwindigkeiten von granularer Feststoffphase und Porenfluid sind die Effekte des Porenfluids jedoch lediglich auf den Spannungstensor der Mischung beschränkt. Im Zwei-Konstituierenden-Modell von Pitman & Le [122] sind verschiedene Geschwindigkeiten und Beschleunigungen von Porenfluid und granularer Feststoffphase angenommen. Die Viskosität des Porenfluids ist vernachlässigt und die Interaktion von Porenfluid und Feststoff mit einer geschwindigkeitsabhängigen Interaktionskraft berücksichtigt.

Ein tiefengemitteltes Modell zur Simulation submariner Hangrutschungen ist von Jiang & LeBlond in [81] vorgestellt. Darin ist das Bodenmaterial als Newton'sches [81] bzw. Bingham'sches Fluid [82] und das umgebende Wasser als nichtviskoses Fluid mit den nichtlinearen Flachwassergleichungen modelliert. Die Kopplung Bodenmaterial-Wasser erfolgt direkt mit Berücksichtigung von Rand- und Übergangsbedingungen in den Modellgleichungen. Rabinovich et. al. [128] verwenden eine modifizierte Version des Modells nach Jiang und LeBlond und erweitern es um Anteile zur Erfassung anfänglich teilweise überseeischer Hangrutschungen. Die Einbindung des Savage-Hutter-Modells in das Jiang-LeBlond-Modell ist in [63] gezeigt.

Kontinuumsmechanische Modelle. Modellierungen im Rahmen der Kontinuumsmechanik bieten die Möglichkeit, den Einfluss verschiedener Bodenkenngrößen auf das Rutsch- und Bewegungsverhalten von Bodenmaterialien detaillierter zu studieren. Die realistische Beschreibung des physikalischen Verhaltens schnell rutschender Bodenmaterialien, auch in Interaktion mit anstehenden Fluidphasen, ist möglich, wenn modellierungsrelevante Materialparameter des Bodens sowie rutschungsrelevante topographische Daten des Geländes bekannt sind.

Kontinuumsmechanische Modelle zur Beschreibung fließender Bodenmaterialien gründen in der Regel auf den Navier-Stokes-Gleichungen kompressibler oder inkompressibler Fluide. Stark vereinfachende Beschreibungen von Bodenmaterialien sind u. a. mit Newton'schen Fluidmodellen möglich. Diesen Ansatz verfolgen z. B. Abadie et. al. [1] mit einem inkompressiblen oder Mader & Gittings [96] mit einem kompressiblen Fluid zur Simulation überseeischer Hangrutschungen und durch sie ausgelöste Wasserwellen. Komplexere Ansätze zur Simulation der aus überseeischen Hangrutschungen generierten Wasserwellen sind von Quecedo et. al. [127] im Rahmen einer Drei-Fluid-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide vorgestellt. Das generalisierte viskoplastische Fluid nach Chen & Ling [26] dient dabei als Ausgangsformulierung der drei Fluide und lässt sich mit entsprechender Wahl der Material-

parameter auf Herschel-Bulkley-Fluide für granulare Bodenmaterialien bzw. auf Newton'sche Fluide für Luft und Wasser zurückführen. Die Fließspannung des Bodenmaterials wird dabei aus dem Fließkriterium nach Mohr-Coulomb ermittelt.

Ein auf den Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide begründetes Mischungsmodell dient Assier-Rzadkiewicz et. al. [7] als Basis ihrer Untersuchung submariner Rutschungen und dadurch ausgelöster Wasserwellen. Die Unterscheidung von Boden und Wasser in der Mischungsphase erfolgt mit dem als Beschreibungsvariable eingeführten Volumenanteil des Bodenmaterials. Das viskoplastische Materialverhalten des Bodens ist mit einem Bingham'schen Fluidmodell berücksichtigt, während das Wasser der Mischungsphase sowie eine mit einem Volume-of-Fluid-Ansatz von der Mischungsphase getrennte Luftphase als linear-viskos modelliert sind. Suspensionsströme an der Oberfläche des Bodenmaterials werden mit einer zusätzlich eingeführten Diffusionsgleichung berücksichtigt. Erweiterungen des Modells zur Erfassung des Porenwasserdruckes sowie um das Mohr-Coulomb-Fließkriterium sind in [98] vorgestellt.

Im Rahmen von Smoothed-Particle-Hydrodynamics-Methoden simulieren Schwaiger & Higman [133] überseeische Hangrutschungen und dadurch ausgelöste Wasserwellen mit einem als Newton'sches Fluid modellierten Bodenmaterial. Die Beschreibung rutschender Bodenmaterialien mit nicht-Newton'schen Modellen erfolgt in den Arbeiten von Rodriguez-Paz & Bonet [130] sowie Laigle et. al. [90] mit Bingham'schen sowie Herschel-Bulkley-Fluiden. Ataie-Ash-tiani & Shobeyri [8] modellieren wellenerzeugende Rutschmaterialien mit einer Kombination aus Bingham'schem Fluid und Cross-Modell.

Diskrete Modelle. Aufgrund der Betrachtung interagierender Einzelkörper bieten sich Diskrete Modelle zur Simulation trockener granularer Medien an, wenn die betrachteten Materialien signifikante Korngrößen auf den betrachteten Skalen aufweisen. Die Vielzahl der numerischen Simulationsmethoden ist allgemein unter dem Begriff Diskrete-Element-Methoden (DEM) [18] zusammengefasst. Einen Überblick über die Einsatzmöglichkeiten der DEM zur Simulation des Verhaltens granularer Medien während industrieller Prozesse gibt z. B. Cleary [32]. Campbell et. al. [25] simulieren Gesteinslawinenbewegungen über große Distanzen und untersuchen die Dynamik des Lawinenprozesses, während Tommasi et. al. [157] sowie Barla & Barla [13] Auslauflängen und finale Positionen vergangener und potentieller Lawinenereignisse berechnen. Die Lawinenmasse in den Berechnungen ist als Anhäufung loser, kugelförmiger, starrer Partikel modelliert. Sitar & McLaughlin [140] und Wu et. al. [163] verwenden deformierbare, polygonal berandete Blöcke zur Modellierung von Lawinenmassen und untersuchen die Auswirkungen verschiedener Modellparameter auf Simulationen realer Lawinenereignisse.

Resümee. Tiefengemittelte Modelle beschreiben die betrachteten Prozesse stark vereinfachend und sind nicht in der Lage, lokale Phänomene exakt abzubilden. Diskrete Modelle hingegen können die Prozesse exakt abbilden, versagen in der Regel jedoch bei hohen Auflösungen mit sehr kleinen Partikeln. Kontinuumsmechanische Modelle weisen die genannten Nachteile tiefengemittelter und diskreter Modelle im Allgemeinen nicht auf. Ihre Anwendbarkeit ist jedoch lediglich auf Bodenmaterialien beschränkt, deren Korngrößenunterschiede und -verteilung die Annahme der Kontinuums-hypothese auf den Skalen der betrachteten Prozesse erlaubt. Entsprechend ist unter Berücksichtigung lediglich makroskopisch homogener Bodenmaterialien die Kontinuumsmechanik zur Modellierung der betrachteten Prozesse im Rahmen dieser Arbeit gewählt. Sie bietet fortgeschrittene Stoffgesetze zur Modellierung sowohl feststoff- als auch

fluidähnlichen Verhaltens granularer Bodenmaterialien und darüber hinaus die Möglichkeit, Interaktionen mit anstehenden Fluiden bzw. mit Porenfluiden als oberflächen- bzw. volumengekoppelte Mehrfeldsysteme zu modellieren.

Fortgeschrittene Materialmodelle. Die zu beschreibenden Prozesse finden je nach betrachtetem Rutschmaterial auf charakteristischen Längenskalen von ca. 10^{-2} m bis 10^3 m statt. Gegenüber dieser Strukturskala (Grobskala) sind die charakteristischen Abmessungen einzelner Körner auf der Komponentenskala (Feinskala) um ca. 3 bis 6 Größenordnungen kleiner. Da bei Rutschungen von Bodenmaterialien im Allgemeinen Korngrößenunterschiede von ≥ 3 Größenordnungen auftreten können, können die zu beschreibenden Materialien ausgeprägt heterogene Materialstrukturen aufweisen und entsprechen somit nur bedingt den Voraussetzungen zur Modellierung mit der Kontinuumsmechanik. Hier kann eine effiziente Beschreibung mit Ersatzmodellen im Rahmen von Mehrskalenmodellierungen erfolgen. Diese Modelle stellen Zusammenhänge zwischen dem Aufbau des Materials und seinem makroskopischen Verhalten her. Der mit diesem Skalenübergang verbundene Mittelungsprozess wird als Homogenisierung bezeichnet. Für allgemeine Darstellungen sei z. B. auf [12, 109, 111] verwiesen.

Es existieren analytische und numerische Homogenisierungsmethoden, wobei analytische Methoden in ihrer Anwendbarkeit lediglich auf elastisches Materialverhalten, kleine Deformationen und einfache Formen von Heterogenitäten beschränkt sind. Numerische Methoden hingegen sind auf ein größeres Spektrum zu modellierender Materialien, u. a. auch Granulate, anwendbar. Dafür ist das heterogene Material durch ein homogenes effektives Ersatzmaterial substituiert. Die Materialeigenschaften des Ersatzmaterials werden durch geeignete Mittelung der entsprechenden Eigenschaften des heterogenen Materials über einen repräsentativen Teilbereich der Feinskala gewonnen. Dieser Teilbereich ist als Repräsentatives Volumenelement (RVE) bezeichnet. Die Größe eines RVEs ist so zu wählen, dass die wesentlichen mechanischen und topologischen Charakteristiken der Feinskala enthalten sind. Die wesentlichen Aufgaben numerischer Homogenisierungsverfahren sind: Wahl eines geeigneten RVEs und Formulierung geeigneter Randbedingungen für das RVE, Festlegung sinnvoller effektiver Variablen auf der Grobskala und Berechnung der effektiven Variablen durch Mittelung der im RVE berechneten Lösung des dort formulierten Randwertproblems. Der Skalenübergang von der Grob- zur Feinskala erfolgt dabei mit Formulierung der Randbedingungen für das RVE, der Skalenübergang von der Fein- zur Grobskala erfolgt mit der Homogenisierung.

Im Rahmen ungekoppelter numerischer Homogenisierungsverfahren werden die Ersatzeigenschaften des mikroheterogenen Materials einmal bestimmt, um daraus Materialgleichungen auf der Grobskala zu formulieren. Bei nichtlinearem Materialverhalten ist die Konsistenz zwischen dem Verhalten des heterogenen Ausgangsmaterials und dem Verhalten des Ersatzmaterials jedoch nicht gewährleistet. Für Granulate mit ausgeprägt nichtlinearem Materialverhalten oder komplizierten Anordnungen von Materialheterogenitäten auf der Feinskala eignen sich gekoppelte numerische Homogenisierungsverfahren. Bei diesen werden für jeden Beanspruchungszustand effektive Feldgrößen an den Integrationspunkten der Grobskala durch Mittelung über das zugehörige RVE gewonnen. Damit ist neben der Lösung des Randwertproblems auf der Grobskala auch an jedem Integrationspunkt des Beobachtungsgebietes das nichtlineare Randwertproblem im zugehörigen RVE zu lösen. Im Unterschied zu ungekoppelten numerischen Homogenisierungsverfahren entfallen jedoch die Materialgleichungen auf der Grobskala. Die Lösung

des Randwertproblems auf der Feinskala erfolgt numerisch. Neben Finite-Element-Methoden sind insbesondere Diskrete-Element-Methoden zur Modellierung des Verhaltens granularer Materialien auf der Feinskala geeignet, wie Andrade et al. [5], Guo & Zhao [59] oder Nitka et al. [112] zeigen. Der Fokus dieser Arbeit liegt jedoch nicht auf Mehrskalmethoden, so dass die Modellierung der betrachteten Prozesse mit Voraussetzung geringer Korngrößen- und -formunterschiede bzw. signifikanter Skalenunterschiede zwischen Grob- und Feinskala erfolgt.

1.3 Ziel und Aufbau der Arbeit

Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines mathematisch-numerischen Modells zur Beschreibung der Bewegung fließender granularer Bodenmaterialien in Interaktion mit möglichen anstehenden Fluidphasen. Das physikalische Verhalten der Boden- und Fluidmaterialien soll phänomenologisch mit den Methoden der Kontinuumsmechanik beschrieben und mit der Finite-Element-Methode numerisch analysiert werden. Der Hauptanwendungsbereich liegt dabei vorerst in der Behandlung trockener bzw. wassergesättigter Böden mit hohem Wasseranteil (z. B. Suspensionen), bei denen der Einfluss von Porenfluiden auf das physikalische Verhalten des Bodens entweder unwesentlich ist oder dominiert. Das ausgeprägt nichtlineare Materialverhalten von Böden geht mit großen inelastischen Deformationen und den jeweiligen Deformationsraten einher, zu deren Beschreibung viskoplastische Stoffgesetze Anwendung finden. Dabei wird die Eignung verschiedener, auf Fluid- und Feststoffformulierungen gründender Ansätze untersucht. Die anstehenden Fluide sind als inkompressible Newton'sche Fluide zu modellieren. Einen weiteren wesentlichen Schwerpunkt der Arbeit stellt die Erfassung der Interaktion von granularen und fluiden Medien im Rahmen oberflächengekoppelter Teilkontinua dar. Dafür soll die Bewegung der sich signifikant verformenden und topologisch ändernden gemeinsamen Grenzflächen mit geeigneten Verfahren erfasst werden. Die nicht mischbaren Teilkontinua sind über die Kopplungsränder mit den dort formulierten und Grenzflächengeometrieinformationen beinhaltenden Erhaltungsgleichungen miteinander verknüpft. Entsprechend ist die Ermittlung von Grenzflächenbewegungen und geometrischen Grenzflächeneigenschaften wesentlich. Vorhandene Verfahren werden untersucht und bewertet. Die Modellierung unstetiger Lösungsverläufe über Grenzflächen hinweg soll mit geeigneten ansatzraumerweiternden Methoden erfolgen. Hier ist der Einsatz finiter Raum-Zeit-Elemente sinnvoll, da die Lokalisierung von Elementknoten mit zu erweiternden Ansätzen so auf natürliche Weise erfolgen kann. Dadurch bleibt der zusätzliche numerische Aufwand gering. Erweiterungen des Ansatzraumes zur Erfassung schwach-unstetiger Lösungsverläufe können im Übergang von konventionellen zu erweiterten Ansätzen problematisch sein. Ausgewählte Verfahren sollen anhand analytischer Lösungen verifiziert werden. Die Anwendbarkeit des monolithisch gekoppelten Gesamtmodells auf Hangrutschungen wird an ausgewählten Fallbeispielen demonstriert.

In Kapitel 2 sind zunächst die maßgebenden kontinuumsmechanischen Größen und Beziehungen oberflächengekoppelter Teilkontinua eingeführt. Neben der Kinematik, den Bilanzgleichungen und den Materialgleichungen stehen die Übergangsbedingungen zur Kopplung von Teilkontinua sowie die das Systemverhalten spezifizierenden Rand- und Anfangsbedingungen im Vordergrund. In Abschnitt 2.2 sind verschiedene numerische Lösungsverfahren erläutert, wobei der Fokus auf der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Raum-Zeit-Finite-Element-Methode liegt. Verschiedene Galerkin-Zeitintegrationsverfahren sind diskutiert und die Ansätze der

physikalischen Zustandsgrößen sowie der Geometrie des gewählten Raum-Zeit-Elementes angegeben. Abschließend ist die Notwendigkeit der Stabilisierung des numerischen Verfahrens erläutert.

Kapitel 3 widmet sich der Dynamik bewegter Grenzflächen sowie der Ermittlung von Grenzflächengeometrieeigenschaften. Dafür sind in Abschnitt 3.1 verschiedene Modelle zur diskreten Beschreibung der Bewegung und Veränderung von Grenzflächen diskutiert und hinsichtlich ihrer Eignung für verschiedene Aufgabenstellungen bewertet. Aufgrund ihrer Flexibilität und der für das Konzept lokal erweiterter Ansatzräume wesentlichen Eigenschaften ist die Level-Set-Methode für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Aufgabenstellungen ausgewählt. Ihre Grundlagen sind in Abschnitt 3.2 vorgestellt, wobei die Bewegungsbeschreibung unter Zuhilfenahme von Abstandsfunktionen und die Diskretisierung mit der Raum-Zeit-Finite-Element-Methode im Vordergrund stehen. Zusätzlich sind verschiedene Verfahren zur Ermittlung von Geometrieinformationen, zur Reinitialisierung degenerierter Abstandsfunktionen und zur Verbesserung von Erhaltungseigenschaften diskutiert. Darauf aufbauend erfolgt in Abschnitt 3.3 die Vorstellung verschiedener Reinitialisierungsverfahren und deren Vergleich bezüglich des Lagefehlers und der Volumenerhaltung im Grenzflächennahbereich. Im abschließenden Abschnitt 3.4 sind verschiedene Verfahren zur Ermittlung von Geometrieinformationen betrachtet und bezüglich des Einheitsnormalenvektor- und des Krümmungsfehlers auf regelmäßigen und gestörten Diskretisierungen sowie bei exakter und reinitialisierter Abstandsfunktion miteinander verglichen.

Der Erfassung grenzflächenunstetiger Beschreibungsgrößen mit erweiterten Ansatzräumen widmet sich Kapitel 4. Die Basis aller ansatzraumerweiternden Finite-Element-Methoden ist die Partition-of-Unity-Finite-Element-Methode. Ihre Grundlagen sind in Abschnitt 4.1 vorgestellt. Die daraus abgeleitete und in dieser Arbeit verwendete erweiterte Finite-Element-Methode als lediglich lokal ansatzraumerweiterndes Verfahren steht im Fokus von Abschnitt 4.2. Darin wird die Konstruktion jeweils angepasster Anreicherungsfunktionen für die auftretenden Lösungsunstetigkeiten gezeigt, wobei die Beibehaltung positiver Eigenschaften der Finite-Element-Approximation und die Vermeidung konvergenzmindernder Terme im Übergang von konventioneller zu lokal erweiterter Approximation ausführlich diskutiert sind. Nachfolgend sind die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Anreicherungsfunktionen sowie die Ableitungsregeln zur Differentiation erweiterter Raum-Zeit-Ansätze angegeben. Im abschließenden Abschnitt 4.3 ist die numerische Integration unstetiger Ansätze diskutiert und die dafür notwendige algorithmische Umsetzung vorgestellt.

In Kapitel 5 steht die Validierung des verwendeten numerischen Verfahrens anhand verschiedener Modellsituationen von Zwei-Fluid-Strömungen mit unstetigen Lösungsverläufen im Vordergrund. Dafür sind wesentliche strömungscharakterisierende Kennzahlen in Abschnitt 5.1 vorgestellt und erläutert. Ausgangspunkt der numerischen Berechnungen ist die zu diskretisierende schwache Form der Modellgleichungen. Sie ist in Abschnitt 5.2 angegeben, wobei verschiedene Möglichkeiten der Formulierung von Materialgleichungen diskutiert sind und deren Einbindung in die schwache Form in Abhängigkeit vom verwendeten Kopplungsverfahren gezeigt ist. Weiterhin ist gezeigt, wie zweite Ableitungen zur Ermittlung von Oberflächenkrümmungen mit partieller Integration der schwachen Form des Laplace-Beltrami-Operators auf Grenzflächen vermieden werden können. Als Abschluss von Abschnitt 5.2 ist die Lösungs-

strategie zur Berechnung des gekoppelten Gesamtsystems oberflächengekoppelter Zwei-Fluid-Systeme erläutert. Die Validierung sprungbehafteter Druckansätze erfolgt in Abschnitt 5.3 am Beispiel einer stehenden Kapillarwelle. Das Beispiel entstammt der Fachliteratur, wodurch der Vergleich verschiedener Methoden zum Einbringen von Oberflächenspannungen mit den in der Literatur angegebenen Ergebnissen möglich ist. In Abschnitt 5.4 sind Konvergenz und Genauigkeit des Verfahrens hinsichtlich schwach un stetiger Geschwindigkeitsverläufe anhand einer Schichtenströmung untersucht. Dafür werden die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Kopplungsverfahren mit grenzflächenunstetigen Anreicherungen und diskret auf Grenzflächen eingebrachten Kopplungsbedingungen verschiedenen auf Betragsanreicherungen gründenden Kopplungsverfahren vergleichend gegenüber gestellt. Im abschließenden Abschnitt 5.5 sind Berechnungen mit erweiterten Ansätzen für alle Beschreibungsvariablen anhand des Beispiels einer Schwerewelle untersucht.

Kapitel 6 widmet sich der numerischen Modellierung von Feststoffen in Euler'scher Betrachtung. Dafür ist in Abschnitt 6.1 zunächst die schwache Form der Modellgleichungen elastischer Materialien als Grundlage der Diskretisierung angegeben. Die Wahl der Spannungsansätze im Rahmen gemischt-hybrider Elemente ist diskutiert und die damit zusätzlich notwendige Ermittlung von Spannungsgradienten dargelegt. Eine mögliche Umsetzung der Spannungs- und Spannungsgradientenberechnung ist vorgestellt und in Abschnitt 6.2 am Beispiel einer rotierenden Kreisscheibe verifiziert. Zur Modellierung granularer Materialien ist eine elasto-viskoplastische Formulierung gewählt. Die damit verbundene Erweiterung des Materialmodells ist in Abschnitt 6.3 vorgestellt und für den ebenen Verzerrungszustand konkretisiert. Fluid-Struktur-Interaktionen sind mit der in Abschnitt 6.4 angegebenen Methodik auf Grundlage der gemischt-hybrid formulierten Strukturelemente realisiert. Die Kopplungsmethodik ist am Beispiel einer schwingenden Platte und deren Schwingungsdämpfung durch ein umgebendes viskoses Fluid in Abschnitt 6.5 untersucht, wobei das Materialverhalten der Platte sowohl elastisch als auch elasto-viskoplastisch modelliert ist. Im abschließenden Beispiel in Abschnitt 6.6 ist die Hangumlagerung von Bodenmaterialien unter verschiedenen inneren Reibungswinkeln gezeigt.

In Kapitel 7 ist die in Kapitel 5 vorgestellte und untersuchte Methodik zur Berechnung von Zwei-Fluid-Strömungen auf drei Fluide erweitert. Dafür sind in Abschnitt 7.1 zunächst verschiedene Modellierungsansätze zur Erfassung dreier nicht mischbarer Fluide mit der Level-Set-Methodik vorgestellt. Diese sind hinsichtlich ihrer Eignung zur Konstruktion erweiterter Ansätze bei signifikant struktur- und gestaltändernden Teilgebieten miteinander verglichen. Darauf aufbauend erfolgt die Definition der hier verwendeten Level-Set-Funktionen, mit Fokus auf die Einbindung in das Konzept der erweiterten Ansätze, insbesondere im Bereich dreier interagierender Fluide. In Abschnitt 7.2 sind Zwei-Fluid- und Drei-Fluid-Formulierung anhand eines dafür speziell konstruierten Beispiels miteinander verglichen. Die Berechnung einer Hangrutschung in ein Gewässer erfolgt für ein Modellbeispiel in Abschnitt 7.3. Die Verwendung unterschiedlicher Materialparameter des verwendeten Bodenmodells dient dem Vergleich verschiedener Szenarien und zeigt anhand der ermittelten Auflaufhöhen den Einfluss der Materialmodellierung. Abschließend sind die Schwächen ortsfester Berechnungsnetze bei ausgeprägt instationären Mehrfluidströmungen anhand der Massenerhaltung des Bodenmaterials aufgezeigt.

2. Modellbildung

Im Fokus dieser Arbeit steht die Beschreibung des physikalischen Verhaltens fließender granularer Bodenmaterialien in Interaktion mit umgebenden Fluiden. Die als makroskopisch homogen angenommenen Materialeigenschaften der betrachteten Phasen motivieren eine Modellierung im Rahmen der Kontinuumsmechanik. Mit Annahme sich räumlich nicht durchdringender Phasen ist die Beschreibung der betrachteten physikalischen Vorgänge als Mehrfeldaufgabe mit oberflächengekoppelten Teilkontinua sinnvoll. Entsprechend folgt ein System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen in Raum und Zeit, für das nur in speziellen Fällen geschlossene analytische Lösungen existieren. Lediglich die Anwendung geeigneter Diskretisierungsverfahren ermöglicht die Bestimmung numerischer Lösungen, die das reale Systemverhalten näherungsweise wiedergeben.

Im folgenden Kapitel sind die maßgebenden kontinuumsmechanischen Größen und Beziehungen in Abschnitt 2.1 eingeführt. Neben der Kinematik, den Bilanzgleichungen und den Materialgleichungen der betrachteten Teilkontinua stehen die Übergangsbedingungen zur Kopplung der Teilkontinua sowie die das Systemverhalten spezifizierenden Rand- und Anfangsbedingungen im Vordergrund. Für eine umfassende Darstellung der Kontinuumsmechanik einschließlich Begriffsdefinitionen und Herleitungen siehe z. B. [4]. In Abschnitt 2.2 sind verschiedene numerische Lösungsverfahren erläutert und die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Raum-Zeit-Finite-Element-Methode ist näher betrachtet. Dafür sind zeitkontinuierliches und zeitdiskontinuierliches Galerkin-Verfahren diskutiert und die Ansätze der physikalischen Zustandsgrößen sowie der Geometrie des gewählten 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelementes angegeben. Abschließend ist die Notwendigkeit der Stabilisierung des numerischen Verfahrens erläutert.

2.1 Kontinuumsmechanik

Grundlegend für die klassische Kontinuumsmechanik ist die Annahme, dass diskrete Mikrostrukturen zu beschreibender Medien auf Makroskalen homogenisierbar sind. Nach Homogenisierung folgt der materielle Körper \mathcal{B} als zusammenhängende Menge materieller Punkte \mathcal{M} . Mit bijektiver Abbildung $\chi_t(\mathcal{B})$ des materiellen Körpers in den Euklidischen Punktraum ist die Konfiguration \mathbf{B}_t zum Zeitpunkt t definiert. Die Bewegung des materiellen Körpers wird als kontinuierliche zeitliche Abfolge von Konfigurationen gedeutet. Mit Vorgabe einer raumfesten Basis \mathcal{O} und nach Einführung einer Referenzkonfiguration \mathbf{B}_0 sind die Ortsvektoren $\mathbf{X} = \chi_0(\mathcal{M})$ aller materiellen Punkte $\mathcal{M} \in \mathcal{B}$ zum festgelegten Zeitpunkt $t = t_0$ bekannt. Die Positionen $\mathbf{x} = \chi_t(\mathcal{M})$ der materiellen Punkte in der aktuellen, als Momentankonfiguration bezeichneten Konfiguration zum Zeitpunkt $t > t_0$ können damit als Funktionen $\varphi_t(\mathbf{X})$ der entsprechenden Ortsvektoren in der Referenzkonfiguration dargestellt werden, siehe Bild 2.1.

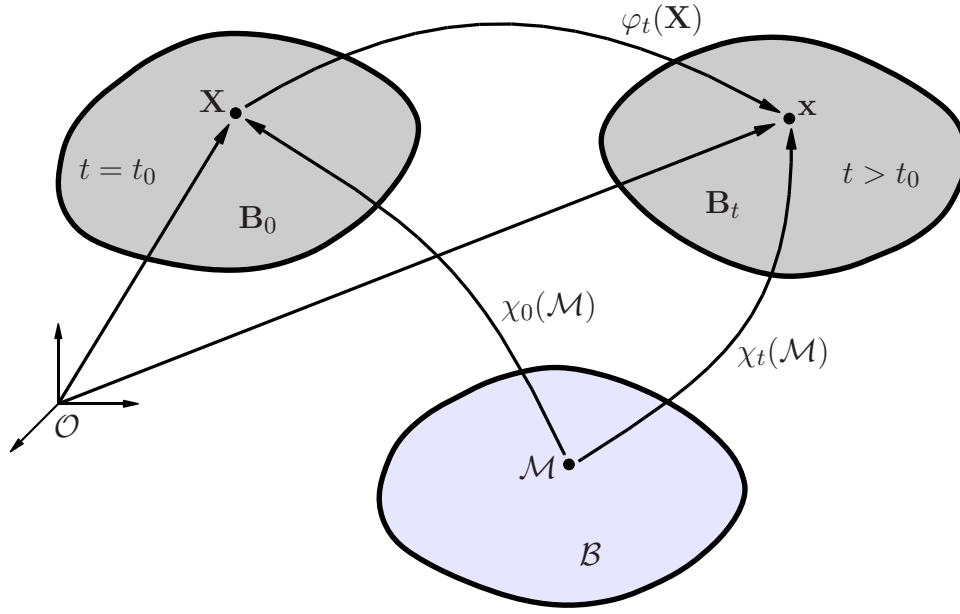


Bild 2.1: Materieller Körper \mathcal{B} sowie Referenzkonfiguration \mathbf{B}_0 und Momentankonfiguration \mathbf{B}_t .

Das räumliche Gebiet einer Konfiguration sowie dessen Rand sind im Weiteren mit Ω_i und Γ_i bezeichnet. Der tiefgestellte Index i dient der Unterscheidung verschiedener relevanter Konfigurationen. Der Rand $\Gamma_i = \Gamma_i^D \cup \Gamma_i^N$ teilt sich in die disjunkten Randabschnitte Γ_i^D und Γ_i^N . Dabei dient der Dirichlet-Teil Γ_i^D der Vorgabe primärer Variablen auf dem Rand, während abgeleitete Größen primärer Variablen auf dem Neumann-Teil Γ_i^N vorgegeben werden.

Bei Festkörpern bleiben die ursprünglichen Nachbarschaftsbeziehungen materieller Punkte während der Bewegung nahezu erhalten. Dies ist bei Fluiden im Allgemeinen nicht der Fall. Dementsprechend existieren unterschiedliche Betrachtungsweisen zur Beschreibung der Bewegung von Kontinua, die Lagrange'sche und die Euler'sche sind im Rahmen dieser Arbeit näher erläutert. In der Lagrange'schen oder materiellen Betrachtungsweise erfolgt die Beschreibung der Bewegung des materiellen Körpers in Abhängigkeit von den Punkten der Referenzkonfiguration,

$$\mathbf{x} = \varphi_t(\mathbf{X}) \quad . \quad (2.1)$$

Ein Beobachter der Bewegung verfolgt die Bahn jedes materiellen Punktes durch den Raum sowie die Veränderung der dem materiellen Punkt zugeordneten physikalischen Eigenschaften. Diese Betrachtungsweise ist vorherrschend in der Festkörpermechanik.

In der Euler'schen oder räumlichen Betrachtungsweise ist die Momentankonfiguration für die Beschreibung der Bewegung ausgewählt. Ein Beobachter verfolgt die zeitliche Veränderung physikalischer Größen an festen Raumpunkten, wobei der Ort eines Raumpunktes während der Zeit von unterschiedlichen materiellen Punkten eingenommen wird. Bei bekannter Bewegungsfunktion ist der Ortsvektor eines materiellen Punktes in der Referenzkonfiguration mit

$$\mathbf{X} = \varphi_t^{-1}(\mathbf{x}) \quad (2.2)$$

gegeben. Diese Betrachtungsweise ist vorherrschend bei Aufgabenstellungen der Strömungsmechanik, sie ist jedoch ebenso zur Beschreibung der Bewegung materieller Körper bei großen Deformationen geeignet.

2.1.1 Kinematik

Die Kinematik beschreibt Bewegungen und Deformationen materieller Körper und formuliert Beziehungen zwischen Verschiebungen und Verzerrungen sowie zwischen Geschwindigkeiten und Verzerrungsgeschwindigkeiten. Die Verschiebung eines materiellen Punktes entspricht dem Differenzvektor \mathbf{u} der zugehörigen Ortsvektoren von Momentan- und Referenzkonfiguration,

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X} \quad . \quad (2.3)$$

Die Deformation in der lokalen Umgebung materieller Punkte ist mit der linearen Abbildung $d\mathbf{x} = \mathbf{F} d\mathbf{X}$ eines infinitesimalen Linienelementes $d\mathbf{X}$ der Referenzkonfiguration auf ein infinitesimales Linienelement $d\mathbf{x}$ der Momentankonfiguration beschrieben. Darin ist

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \nabla_0 \mathbf{x} = \mathbf{1} + \nabla_0 \mathbf{u} \quad (2.4)$$

der materielle Deformationsgradient, $\mathbf{1}$ ist der Einheitstensor 2. Stufe und ∇_0 der Gradient bezüglich der materiellen Ortsvektoren \mathbf{X} der Referenzkonfiguration. Die Umkehrabbildung $d\mathbf{X} = \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x}$ erfolgt mit dem inversen oder räumlichen Deformationsgradienten

$$\mathbf{F}^{-1} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \nabla \mathbf{X} = \mathbf{1} - \nabla \mathbf{u} \quad , \quad (2.5)$$

wobei ∇ der Gradient bezüglich der räumlichen Ortsvektoren \mathbf{x} der Momentankonfiguration ist. Beide Tensoren sind richtungsabhängig und unsymmetrisch und beziehen sich auf den gesamten Bewegungsvorgang inklusive Starrkörperbewegungen. Daher sind sie als Verzerrungsmaße zur Formulierung von Materialgesetzen ungeeignet. Ein geeignetes Verzerrungsmaß in der Referenzkonfiguration ist der Green'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) \quad . \quad (2.6)$$

Er ist symmetrisch und nimmt bei Starrkörperbewegungen und Identitätsabbildungen den Wert Null an. Sein räumliches Gegenstück, der Almansi'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{A} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1} = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - (\mathbf{F} \mathbf{F}^T)^{-1}) \quad , \quad (2.7)$$

ist darüber hinaus räumlich objektiv. Die materielle Zeitableitung $\frac{D\Psi}{Dt} = \dot{\Psi}$ beschreibt die zeitliche Änderung der physikalischen Größe Ψ eines sich bewegendes materiellen Punktes. Neben der Zustandsgröße Ψ ist auch der Ortsvektor des betrachteten materiellen Punktes zeitveränderlich. Mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$ des materiellen Punktes folgt in Euler'scher Betrachtung

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \Psi \cdot \mathbf{v} \quad . \quad (2.8)$$

Darin erfasst die lokale Zeitableitung $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ die zeitliche Änderung von Ψ und die konvektive Zeitableitung $\nabla \Psi \cdot \mathbf{v}$ die Änderung von Ψ infolge räumlicher Änderung des betrachteten materiellen Punktes. In Lagrange'scher Betrachtung entfällt der konvektive Anteil, da die betrachtete Zustandsgröße auf den zeitunabhängigen Ortsvektor \mathbf{X} der Referenzkonfiguration bezogen ist. Damit ist die materielle Zeitableitung gleich der lokalen Zeitableitung $\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial t}$.

Die materielle Zeitableitung des materiellen Deformationsgradienten folgt zu

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \nabla \mathbf{v} \mathbf{F} \quad , \quad (2.9)$$

mit dem räumlichen Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \mathbf{v}$. Der symmetrische Anteil

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) \quad (2.10)$$

des Geschwindigkeitsgradienten ist die Verzerrungsgeschwindigkeit, die ein objektives Maß der Verzerrungsrate der Bewegung in der Momentankonfiguration darstellt. Sie folgt u. a. auch aus der unteren Oldroyd-Ableitung (2.31) des Almansi'schen Verzerrungstensors,

$$\mathbf{D} = \overset{\Delta}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} + (\nabla \mathbf{v})^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \nabla \mathbf{v} \quad . \quad (2.11)$$

Der Zusammenhang zwischen den Verzerrungsgeschwindigkeiten von Referenz- und Momentankonfiguration ist mit

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}} + (\dot{\mathbf{F}})^T \mathbf{F}) = \mathbf{F}^T \mathbf{D} \mathbf{F} \quad (2.12)$$

gegeben und entspricht dem Zurückziehen (pull-back) der Verzerrungsgeschwindigkeit in die Referenzkonfiguration.

2.1.2 Spannungen

Äußere Krafteinwirkungen auf materielle Körper rufen im Körperinneren Beanspruchungszustände hervor. Die Kenngröße dieser Beanspruchungen ist die mechanische Spannung, die wie die Verzerrung konfigurationsabhängig beschrieben wird. In der Momentankonfiguration ist der Spannungszustand eines materiellen Punktes bezüglich eines gedachten Schnittes durch den Punkt mit dem auf das differentielle Schnittflächenelement da wirkenden aktuellen Kraftvektor $d\mathbf{f}$ durch den Cauchy'schen Spannungsvektor $\mathbf{t} = d\mathbf{f}/da$ charakterisiert. Die lineare Abhängigkeit des Spannungsvektors von der Schnittflächennormalen \mathbf{n} führt mit dem Cauchy-Theorem

$$\mathbf{t} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \quad (2.13)$$

auf den Cauchy'schen Spannungstensor \mathbf{T} , der die aktuelle Beanspruchung des materiellen Punktes eindeutig, d. h. bezüglich aller möglichen Schnittflächen durch den Punkt, beschreibt. Wird der aktuelle Kraftvektor auf das differentielle Schnittflächenelement dA der Referenzkonfiguration bezogen, folgt mit $\mathbf{n} da = \det \mathbf{F} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} dA$ der 1. Piola-Kirchhoff Spannungstensor

$$\mathbf{P} = \det \mathbf{F} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} \quad , \quad (2.14)$$

der jedoch Nachteile bei der Formulierung von Werkstoffgleichungen aufweist. Der dafür besser geeignete 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensor

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P} = \det \mathbf{F} \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} \quad (2.15)$$

entsteht, wenn auch der aktuelle Kraftvektor $d\mathbf{f}$ in die Referenzkonfiguration transformiert wird. \mathbf{S} stellt eine reine Rechengröße dar, so dass seine Komponenten physikalisch nur eingeschränkt interpretierbar sind.

2.1.3 Bilanzgleichungen

Bilanzgleichungen stellen grundlegende Aussagen über die zeitliche Änderung beschreibungsrelevanter und den Zustand des materiellen Körpers charakterisierender physikalischer Größen zur Verfügung. Sie sind als allgemeingültige Naturgesetze unabhängig von der Kontinuumsannahme und den das Materialverhalten beschreibenden Werkstoff- bzw. Materialgleichungen. Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Prozesse beziehen lediglich isotherme Zustandsänderungen isotroper Materialien in abgeschlossenen Systemen ein. Damit beschreiben die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Drehimpuls neben den noch zu definierenden Materialgleichungen und unter Hinzunahme von Rand-, Anfangs- und Übergangsbedingungen das Systemverhalten eindeutig.

Massenbilanz. Die Massenbilanz folgt aus der Annahme, dass die Masse eines materiellen Punktes während der Bewegung materieller Körper konstant bleibt. Mit der Abbildungsvorschrift $dv = \det \mathbf{F} dV$ des differentiellen Volumenelementes dV der Referenz- auf das differentielle Volumenelement dv der Momentankonfiguration folgt die lokale Form der Massenbilanz

$$\rho_0 = \rho \frac{dv}{dV} = \rho \det \mathbf{F} \quad (2.16)$$

in Lagrange'scher Betrachtungsweise. Darin sind ρ_0 und ρ die jeweiligen Dichten des betrachteten materiellen Punktes in Referenz- und Momentankonfiguration. Die materielle Zeitableitung von (2.16) führt auf die lokale Form der Massenbilanz in Euler'scher Betrachtungsweise,

$$\dot{\rho} + \rho (\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0 \quad (2.17)$$

Diese auch als Kontinuitätsgleichung bezeichnete Erhaltungsgleichung beschreibt die Massenbilanz eines ortsfesten differentiellen Volumenelementes als Summe aus zeitlicher Änderung der Masse im Volumenelement und dem Massenfluss über die Oberfläche des Volumenelementes. Für inkompressible Materialien mit zeitlich konstanter Dichte vereinfacht sich (2.17) zu

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.18)$$

Impulsbilanz. Der Impuls \mathbf{I}_M eines Körpers in der Momentankonfiguration ist mit

$$\mathbf{I}_M = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{v} d\Omega \quad (2.19)$$

definiert und beschreibt die Bewegung eines massebehafteten Körpers. Die zeitliche Änderung des Impulses ist gleich der Summe aller auf den Körper einwirkenden Kräfte,

$$\dot{\mathbf{I}}_M = \frac{D}{Dt} \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_t} \bar{\mathbf{t}} d\Gamma \quad (2.20)$$

Darin ist \mathbf{b} der Vektor der massenbezogenen Beschleunigungen und $\bar{\mathbf{t}}$ sind die auf der Oberfläche des Körpers angreifenden eingprägten Spannungen. Der Zusammenhang zwischen dem Spannungszustand der Oberfläche und den eingprägten Oberflächenspannungen ist mit $\bar{\mathbf{t}} = \mathbf{t}$

und dem Cauchy-Theorem (2.13) gegeben. Mit Berücksichtigung der lokalen Massenbilanz (2.17) und des Gauß'schen Integralsatzes folgt die lokale Form der Impulsbilanz

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{b} \quad (2.21)$$

in der Momentankonfiguration. Ähnliche Überlegungen führen auf die lokale Form der Impulsbilanz in der Referenzkonfiguration,

$$\rho_0 \dot{\mathbf{v}} = \nabla_0 \cdot \mathbf{P} + \rho_0 \mathbf{b}_0 \quad , \quad (2.22)$$

wenn die Größen der Momentankonfiguration in (2.20) durch die entsprechenden Größen der Referenzkonfiguration substituiert werden.

Drehimpulsbilanz. Der Drehimpuls \mathbf{L}_M bezüglich eines beliebigen, mit dem Ortsvektor $\bar{\mathbf{x}}$ gekennzeichneten, raumfesten Punktes der Momentankonfiguration ist definiert als

$$\mathbf{L}_M = \int_{\Omega_t} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \times \rho \mathbf{v} \, d\Omega \quad . \quad (2.23)$$

Die zeitliche Änderung des Drehimpulses ist gleich der vektoriellen Summe aller aus einwirkenden Kräften resultierenden Momente bezüglich $\bar{\mathbf{x}}$. Mit Beschränkung auf Boltzmann-Kontinua, d. h. dem Ausschluss flächen- und volumenhaft verteilter Momente, folgt die Symmetrie des Cauchy'schen Spannungstensors in der Momentankonfiguration und mit (2.15) auch die Symmetrie des 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensors in der Referenzkonfiguration,

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad , \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}^T \quad . \quad (2.24)$$

Der nach (2.14) definierte 1. Piola-Kirchhoff Spannungstensor ist im Allgemeinen unsymmetrisch und damit weniger geeignet zur Formulierung von Werkstoffgleichungen.

2.1.4 Materialgleichungen

Die in Abschnitt 2.1.1 angegebenen Grundgleichungen der Kinematik sowie die in Abschnitt 2.1.3 angegebenen Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Drehimpuls sind allgemeingültig und weitestgehend unabhängig von speziellen Eigenschaften des Kontinuums. Die Verknüpfung dieser materialunabhängigen Gleichungen erfolgt mit den Materialgleichungen, die ausgehend vom zu beschreibenden Materialverhalten Zusammenhänge zwischen Spannungen bzw. Spannungsraten und Verzerrungen bzw. Verzerrungsgeschwindigkeiten in mathematischen Modellen bereit stellen. Die Überlegungen, die auf die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Materialgleichungen nicht-Newton'scher Fluide und daraus abgeleiteter Spezialfälle sowie elastischer Materialien in Euler'scher Betrachtungsweise als Basis elasto-viskoplastischer Materialformulierungen führen, sind nachfolgend dargestellt.

Nicht-Newton'sche Fluide. Im allgemeinen Fall strömender Fluide ohne viskoelastische Phase und mit Beschränkung auf homogene isotrope Fluide ist rein viskoses Materialverhalten mit der Werkstoffgleichung des Reiner-Rivlin-Fluids beschrieben [75]. Unter Vernachlässigung quadratischer Verzerrungsgeschwindigkeitsanteile und bei Annahme isothermer Prozesse und

inkompressiblen Materialverhaltens folgt die Aufteilung des Cauchy'schen Spannungstensors in einen Druck- und einen Deviatoranteil,

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{1} + \mathbf{T}^{\text{dev}} \quad , \quad \mathbf{T}^{\text{dev}} = 2\eta \mathbf{D} \quad . \quad (2.25)$$

Im allgemeinen Fall nicht-Newton'scher Fluide ist der Deviatoranteil \mathbf{T}^{dev} nichtlinear mit dem Verzerrungsgeschwindigkeitstensor \mathbf{D} verknüpft. Dafür ist die effektive Viskosität η als Funktion der Scherverzerrungsrate

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2\mathbf{D} : \mathbf{D}} \quad (2.26)$$

gewählt. Das Fluidmodell soll zur Beschreibung fließender Bodenmaterialien eingesetzt werden, die unterhalb einer Fließspannung τ^0 kein oder lediglich geringes Deformationsverhalten aufweisen. Nach Überschreiten der Fließspannung beginnt das Material zu fließen, wobei der Materialwiderstand gegenüber Deformationen abnimmt, während die initiale Struktur des Bodenmaterials zerstört wird. Das Material verhält sich im Bereich kleiner Scherverzerrungsraten strukturviskos. Zur Modellierung des beschriebenen Materialverhaltens ist ein mit dem Ansatz nach Papanastasiou [117] regularisiertes Herschel-Bulkley-Modell mit der effektiven Viskosität

$$\eta = \eta(\dot{\gamma}, \tau^0) = m \dot{\gamma}^{(n-1)} + (1 - e^{-r\dot{\gamma}}) \frac{\tau^0}{\dot{\gamma}} \quad (2.27)$$

gewählt. Darin verhindert $1 - e^{-r\dot{\gamma}} < \dot{\gamma}$ mit $r \leq 1$ die Division durch Null bei verschwindenden Scherverzerrungsraten. Fließindex n und Konsistenzfaktor m bestimmen den Anstieg der Fließkurve des jeweils zu beschreibenden Materials. Für $0 < n < 1$ folgt strukturviskoses und für $n > 1$ dilatantes Materialverhalten, $n = 1$ führt auf linear-viskose bzw. linear-viskoplastische Fluide, wobei der Konsistenzfaktor m dann gleich der dynamischen Viskosität μ ist. Spezielle Vereinfachungen des allgemeinen Modelles (2.27) führen auf weitere technisch wichtige Sonderfälle. So folgt für $\tau^0 = 0$ das Modell des Ostwald-de-Waele (Power-Law) Fluids und für $n = 1$ das Modell des Bingham'schen Fluids. Sind $\tau^0 = 0$ und $n = 1$ gesetzt, folgt das Newton'sche Fluidmodell. Die jeweiligen Fließkurven sind in Bild 2.2 skizziert.

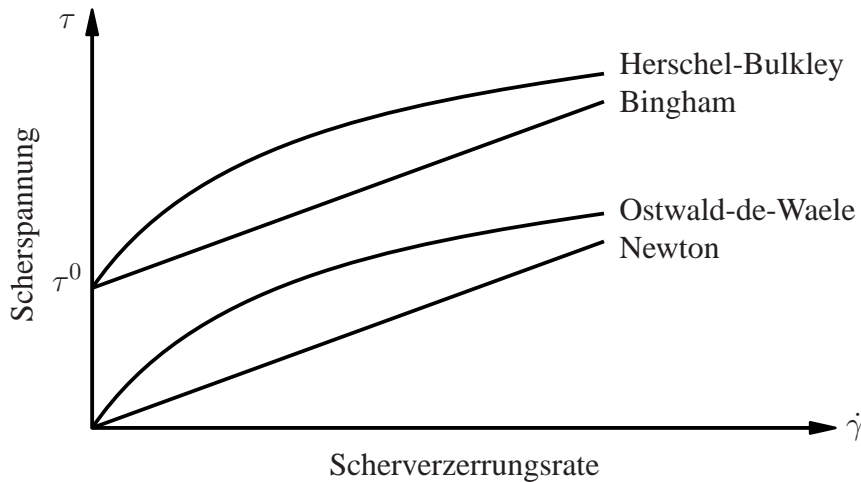


Bild 2.2: Scherverzerrungsraten-Scherspannungs-Fließkurven verschiedener Fluide.

Elastische Materialien in Euler'scher Betrachtung. Die Beschreibung elastischen Festkörperverhaltens erfolgt in dieser Arbeit mit einer rein mechanischen Theorie elastischer Materialien, d. h. mit Beschränkung auf reversible und isotherme Prozesse. Das Materialgesetz ist mit den energetisch konjugierten Maßen für Spannungen und Verzerrungen als Zusammenhang

$$\mathbf{S} = \underline{\mathbf{C}} : \mathbf{E} \quad (2.28)$$

zwischen 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensor \mathbf{S} und Green'schem Verzerrungstensor \mathbf{E} in der Referenzkonfiguration formuliert. Die Symmetrie beider Tensoren führt im allgemeinsten Fall auf 36 unabhängige Materialkennwerte im vierstufigen Elastizitätstensor $\underline{\mathbf{C}}$. Für kleine Verzerrungen bei endlichen Verschiebungen und Verdrehungen folgt unter Annahme homogenen und isotropen Materialverhaltens und unter Voraussetzung einer spannungsfreien Referenzkonfiguration die Materialgleichung Saint-Venant-Kirchhoff'scher Materialien,

$$\mathbf{S} = \lambda \operatorname{tr}(\mathbf{E}) \mathbf{1} + 2\mu \mathbf{E} \quad , \quad (2.29)$$

mit den Lamé-Konstanten λ und μ als verbleibenden Materialkennwerten. Der Zusammenhang zwischen den Lamé-Konstanten und den technisch gebräuchlichen Materialparametern Elastizitätsmodul E und Querkontraktionszahl ν sind z. B. in [71, 85] angegeben. Die zeitliche Konstanz der Materialkennwerte ermöglicht die Ratenformulierung

$$\underline{\mathbf{C}}^{-1} : \dot{\mathbf{S}} - \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{0} \quad (2.30)$$

der Werkstoffgleichung (2.28). Mit der oberen ∇ (kontravarianten) und der unteren Δ (kovarianten) Oldroyd-Ableitung eines zweistufigen Tensors $(*)$,

$$\overset{\nabla}{(*)} = (\dot{*}) - \nabla \mathbf{v} (*) - (*) (\nabla \mathbf{v})^T \quad , \quad \overset{\Delta}{(*)} = (\dot{*}) + (\nabla \mathbf{v})^T (*) + (*) \nabla \mathbf{v} \quad , \quad (2.31)$$

führen das Vorschieben (push-forward) der Rate des 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensors sowie der Rate des Green'schen Verzerrungstensors,

$$\mathbf{F} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{F}^T = \overset{\nabla}{\tilde{\mathbf{T}}} - \nabla \mathbf{v} \tilde{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{T}} (\nabla \mathbf{v})^T = \overset{\nabla}{\tilde{\mathbf{T}}} \quad , \quad \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{D} = \overset{\Delta}{\tilde{\mathbf{A}}} \quad , \quad (2.32)$$

auf die Raten $\overset{\nabla}{\tilde{\mathbf{T}}}$ des Kirchhoff'schen Spannungstensors $\tilde{\mathbf{T}} = \det \mathbf{F} \mathbf{T}$ sowie $\overset{\Delta}{\tilde{\mathbf{A}}}$ des Almansi'schen Verzerrungstensor als mögliche für Werkstoffbeziehungen zu verwendende Paarung von Spannungs- und Verzerrungsraten in der Momentankonfiguration. Aufgrund kontravarianter Komponenten des Spannungstensors und kovarianter Komponenten des Verzerrungstensors ist das Vorschieben für beide Tensoren unterschiedlich definiert. Mit vorgeschobenem materiellen Elastizitätstensor $\underline{\mathbf{C}}$ folgt das räumliche Gegenstück der materiellen Stoffgleichung (2.30),

$$\underline{\mathbf{c}}^{-1} : \overset{\nabla}{\tilde{\mathbf{T}}} - \mathbf{D} = \mathbf{0} \quad , \quad (2.33)$$

mit dem räumlichen Elastizitätstensor $\underline{\mathbf{c}}$, dessen Koeffizienten jedoch nicht konstant sind [120]. Aufgrund der Annahme kleiner elastischer Verzerrungen in granularen Medien ist im Rahmen dieser Arbeit vereinfachend $\underline{\mathbf{c}} = \underline{\mathbf{C}}$ und damit $\underline{\mathbf{c}}^{-1} = \underline{\mathbf{C}}^{-1}$ gewählt. Da die Beschreibung mit

dem Cauchy'schen Spannungstensor erfolgt, ist die Rate der Kirchhoff-Spannungen nach den Cauchy-Spannungen aufzulösen,

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \det \mathbf{F} \left(\overset{\nabla}{\mathbf{T}} + (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{T} \right) = \frac{\rho_0}{\rho} \overset{\square}{\mathbf{T}} \quad . \quad (2.34)$$

Darin ist $\overset{\square}{\mathbf{T}} = \overset{\nabla}{\mathbf{T}} + (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{T}$ die Truesdell-Rate des Cauchy'schen Spannungstensors und $\det \mathbf{F}$ folgt mit (2.16) als Verhältnis von Referenzdichte ρ_0 und aktueller Dichte ρ . Entsprechend der getroffenen Annahmen folgt die räumliche Ratenformulierung elastischer Materialien in der hier verwendeten Form mit

$$\underline{\mathbf{C}}^{-1} : \frac{\rho_0}{\rho} \overset{\square}{\mathbf{T}} - \mathbf{D} = \mathbf{0} \quad . \quad (2.35)$$

Die Erweiterung von (2.35) auf elasto-viskoplastische Materialformulierungen zur Modellierung granularer Bodenmaterialien ist in Abschnitt 6.3 vorgestellt.

2.1.5 Rand- und Anfangsbedingungen

Die vorgestellten Grundgleichungen der Kinematik sowie die Bilanz- und Materialgleichungen sind Ausgangspunkt der numerischen Berechnungen im Rahmen dieser Arbeit und beinhalten als technisch wichtige Sonderfälle die Ausgangsgleichungen zur Beschreibung linear-viskoser inkompressibler Fluide und linear-elastischer Festkörper. Die jeweils bereitzustellenden Gleichungen bilden ein System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen in Raum und Zeit. In der vorgestellten Form sind sie zur Lösung konkreter Aufgaben jedoch noch nicht lösbar. Erst die Vorgabe von Rand- und Anfangsbedingungen vervollständigt die konkrete Aufgabenstellung und führt auf eine entsprechende Lösung der Differentialgleichung.

Die Ausgangsgleichungen zur Beschreibung viskoser inkompressibler Fluide sind mit (2.10), (2.21) und (2.25) gegeben. Mit Annahme der Dichtebeständigkeit entfällt der Zusammenhang zwischen Dichtefeld und Druckverteilung im Fluid. Damit tritt der Druck als zusätzliche Zustandsgröße, jedoch ohne Zustandsgleichung auf. Die Kontinuitätsgleichung (2.18) als weitere beschreibende Gleichung ist damit Nebenbedingung für die Druckverteilung und erfordert keine zusätzlichen Randbedingungen. Mit den Anfangsbedingungen

$$\mathbf{v}(t_a) = \mathbf{v}_a \quad \text{und} \quad \nabla \cdot \mathbf{v}_a = 0 \quad \forall \mathbf{x}_a \in \Omega_a \quad (2.36)$$

ist auch der initiale Druckzustand implizit über die Forderung eines divergenzfreien initialen Geschwindigkeitsfeldes festgelegt. Aufgrund der Euler'schen Betrachtung sind die Anfangsbedingungen in (2.36) bezüglich der Ausgangskonfiguration \mathbf{B}_a zur festgelegten Zeit $t = t_a$ gegeben. Die Vorgabe geometrischer und dynamischer Randbedingungen auf den in Abschnitt 2.1 definierten Dirichlet- und Neumann-Randabschnitten der Momentankonfiguration,

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_t^D \quad \text{und} \quad \mathbf{t} = \bar{\mathbf{t}} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_t^N \quad , \quad (2.37)$$

vervollständigt die Anfangs-Randwertaufgabe der Dynamik viskoser inkompressibler Fluide. Darin sind $\bar{\mathbf{v}}$ eingeprägte Geschwindigkeiten und $\bar{\mathbf{t}}$ eingeprägte Randspannungen. Bei alleiniger Vorgabe geometrischer Randbedingungen an allen äußeren Rändern sind die eingeprägten

Geschwindigkeiten aufgrund der Inkompressibilität des Fluids so zu wählen, dass die Normalkomponente der Randflüsse im Integral über den Rand verschwindet. Damit ist der Druck bei alleiniger Vorgabe geometrischer Randbedingungen bis auf eine Konstante eindeutig bestimmt. Diese ist als „Randbedingung“ an einem Punkt des Gebietes vorzugeben.

Die Ausgangsgleichungen zur Beschreibung linear-elastischen Festkörperverhaltens in Euler'scher Betrachtung sind mit (2.11), (2.17) (2.21) und (2.30) gegeben. Der Ausgangszeitpunkt $t = 0$ der numerischen Berechnung ist so gewählt, dass er mit dem die Referenzkonfiguration definierenden Zeitpunkt t_0 zusammen fällt. Damit ist der betrachtete Festkörper zu Beginn der Berechnung per Definition spannungsfrei, so dass Anfangsbedingungen für die Verschiebungen, die Geschwindigkeiten sowie für die Dichte zu setzen sind,

$$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 = \mathbf{0} \quad , \quad \mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}_0 \quad , \quad \rho(t_0) = \rho_0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_0 \quad . \quad (2.38)$$

Die Berechnung des Verschiebungsfeldes ist in der gewählten Betrachtungsweise jedoch von untergeordneter Bedeutung und hier nicht weiter betrachtet. Dafür ist der geometrische Ort von Grenzflächen zur Abgrenzung des Festkörpers zu anderen Medien und zum Einbringen von Übergangsbedingungen bedeutend. Im Rahmen dieser Arbeit erfolgt die Erfassung von Grenzflächen mit der Level-Set-Methodik, die in Abschnitt 3.2 vorgestellt ist.

Die Vorgabe geometrischer und dynamischer Randbedingungen auf den in Abschnitt 2.1 definierten Dirichlet- und Neumann-Randabschnitten der Momentankonfiguration,

$$\rho \mathbf{v} = \bar{\rho} \bar{\mathbf{v}} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_t^D \quad \text{und} \quad \mathbf{t} = \bar{\mathbf{t}} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_t^N \quad , \quad (2.39)$$

mit den eingepprägten Randmassenflüssen $\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}$ und den eingepprägten Randspannungen $\bar{\mathbf{t}}$, vervollständigt die Anfangs-Randwertaufgabe der geometrisch nichtlinearen Elastodynamik in Euler'scher Betrachtung.

2.1.6 Übergangsbedingungen

Der im Rahmen dieser Arbeit betrachtete materielle Körper setzt sich aus einer endlichen Anzahl verschiedener nicht mischbarer Materialien zusammen, die ausgeprägte gemeinsame Grenzflächen besitzen. Der Austausch physikalischer Informationen zwischen den Materialien findet lediglich über diese Grenzflächen statt und führt auf die Modellvorstellung oberflächengekoppelter Teilkontinua. Beidseitig von materiellen Grenzflächen können gleiche physikalische Feldgrößen unterschiedliche Werte aufweisen (Sprünge), so dass die in Abschnitt 2.1.3 unter Annahme hinreichender Stetigkeit angegebenen lokalen Bilanzgleichungen im Bereich von Grenzflächen um Übergangsbedingungen zu erweitern sind.

Bild 2.3 zeigt das Gebiet $\Omega_t = \Omega_t^1 \cup \Omega_t^2$ der Momentankonfiguration, das in die von verschiedenen Medien belegten, disjunkten offenen räumlichen Teilgebiete Ω_t^1 und Ω_t^2 unterteilt ist. Die Grenzfläche Σ_t trennt beide Teilkontinua voneinander. Mit Annahme verschwindender Grenzflächendicke auf den betrachteten Skalen folgt die Beziehung $\bar{\mathbf{n}} = \mathbf{n}_2 = -\mathbf{n}_1$ zwischen dem Grenzflächennormalenvektor $\bar{\mathbf{n}}$ und den äußeren Normalenvektoren \mathbf{n}_1 und \mathbf{n}_2 der Teilkontinua.

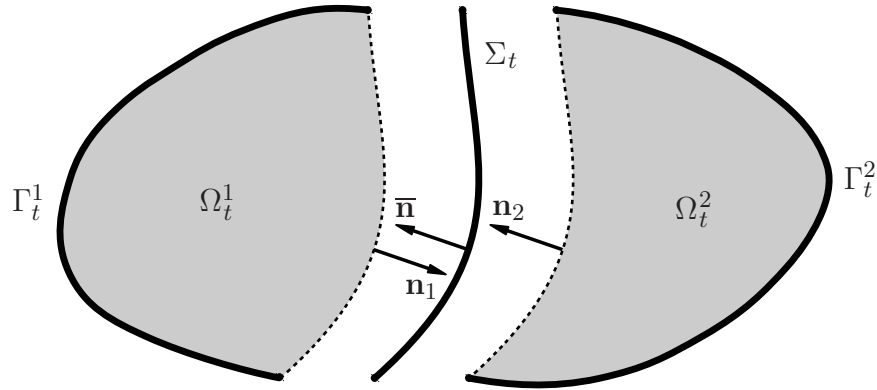


Bild 2.3: Oberflächengekoppelte Teilkontinua mit Grenzfläche und Normalenvektordefinitionen.

Der Sprung einer physikalischen Größe $(*)$ über die Grenzfläche hinweg ist mit dem Sprungterm

$$[[(*)]] = (*)_1 - (*)_2 \quad (2.40)$$

definiert. Darin sind $(*)_1$ und $(*)_2$ die mit den jeweiligen Indizes der Gebietszugehörigkeit angegebenen Werte der betrachteten physikalischen Größe beidseitig der Grenzfläche. Unter Ausschluss von Gleitflächen und mit Annahme impermeabler Grenzflächen folgt die Übergangsbedingung der Massenbilanz als geometrische Übergangsbedingung,

$$[[\mathbf{v}]] = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad . \quad (2.41)$$

Das Gleichgewicht der Kräfte auf der Grenzfläche ist als Übergangsbedingung für die Impulsbilanz formuliert. Bei dominierenden Oberflächenspannungseffekten ist neben den Spannungsvektoren \mathbf{t}_1 und \mathbf{t}_2 beider Gebiete auch der Kapillardruck p^c zwischen den grenzflächenseitigen Materialien zu berücksichtigen. Mit dem Cauchy-Theorem (2.13) folgt

$$[[\mathbf{T}]] \cdot \bar{\mathbf{n}} + p^c \cdot \bar{\mathbf{n}} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad . \quad (2.42)$$

Eine unabhängige Übergangsbedingung für den Drehimpuls existiert nicht.

Oberflächenspannungen. Als Resultat des Kräftegleichgewichts molekularer Bindungskräfte an der Oberfläche eines Fluids entstehen Oberflächenspannungen. Die Spannungsvektoren der Oberflächenspannung sind normal zur Oberfläche in das Fluidinnere gerichtet und bewirken einen Drucksprung an der Fluidoberfläche. Diese Druckdifferenz ist als Kapillardruck p^c bezeichnet und folgt mit der Young-Laplace-Gleichung

$$p^c = \sigma_0 \kappa \quad (2.43)$$

aus dem Produkt eines materialgebundenen Koeffizienten σ_0 der Oberflächenspannung mit der mittleren Oberflächenkrümmung κ . Im Rahmen dieser Arbeit ist angenommen, dass der Oberflächenspannungskoeffizient konstant entlang der Oberfläche ist, womit der Kapillardruck linear mit den Oberflächenkrümmungen verknüpft ist.

2.2 Lösungsverfahren

Die mathematische Beschreibung des physikalischen Verhaltens realer Systeme führt mit den Annahmen der Kontinuumsmechanik im Allgemeinen auf Systeme nichtlinearer partieller Differentialgleichungen in Raum und Zeit, für die nur in Ausnahmefällen geschlossene analytische Lösungen existieren. Die Anwendung geeigneter Diskretisierungsverfahren ermöglicht jedoch die Bestimmung numerischer Lösungen, die das reale Systemverhalten näherungsweise wiedergeben. Dafür sind die Modellgleichungen zu diskretisieren, d.h. in einen Satz algebraischer Bestimmungsgleichungen für eine endliche Anzahl diskreter physikalischer Beschreibungsvariablen zu überführen. Mit den die Aufgabenstellung vervollständigenden Rand- und Anfangsbedingungen folgt die Näherungslösung der Modellgleichungen durch Bestimmung der diskreten physikalischen Freiwerte.

Etablierte Verfahren zur Diskretisierung kontinuumsmechanischer Modellgleichungen sind Finite-Element-Methoden (FEM), Randelement-Methoden (REM), Finite-Differenzen-Verfahren (FDV) und Finite-Volumen-Methoden (FVM). Die in der nichtlinearen Strukturmechanik bevorzugt eingesetzte FEM gründet auf einer den Modellgleichungen äquivalenten schwachen Form und stückweise stetigen, knotenweise definierten Ansatzfunktionen auf lokalen Trägern. Aufgrund möglicher unstrukturierter Netze ist sie besonders flexibel bezüglich beliebiger Berandungen und örtlicher Netzverdichtungen. Für Aufgabenstellungen in unendlich ausgedehnten Gebieten oder mit Randbedingungen im Unendlichen eignet sich die ebenfalls auf einer schwachen Form der Modellgleichungen gründende REM, da die zu diskretisierende Integralgleichung lediglich auf dem Rand des Gebietes formuliert ist. Im Bereich der numerischen Strömungsmechanik konkurrieren verschiedene Diskretisierungsverfahren. Neben dem die Modellgleichungen auf strukturierten Netzen mit Differenzenquotienten approximierenden FDV ist insbesondere die auf integralen Erhaltungssätzen gründende FVM aufgrund der Kontrollvolumen-Formulierung, der Konservativität der Methode und der möglichen Verwendung unstrukturierter Netze das bevorzugte Diskretisierungsverfahren der Strömungsmechanik. Zunehmend findet jedoch auch die FEM, vor allem zur Lösung von Aufgabenstellungen aus dem Bereich der Fluid-Struktur-Wechselwirkung oder bei zeitveränderlichen komplexen Berandungen des Strömungsfeldes, Anwendung in der Strömungsmechanik.

Neben diesen etablierten Diskretisierungsverfahren existieren eine Reihe weiterer Verfahren in der numerischen Strömungsmechanik, die z. T. auf spezielle Anwendungen beschränkt sind oder erst in jüngerer Zeit als Alternative zu den etablierten Diskretisierungsverfahren Beachtung finden. Dazu zählen Spektralverfahren, Smoothed-Particle-Hydrodynamics-Methoden (SPH) und Gittergas-Methoden. Bei Spektralverfahren sind die Ansatz- und Wichtungsfunktionen einer schwachen Form mit Fourierreihen oder Tschebyscheff-Polynomen als Ganzfeldansätze formuliert. Die Genauigkeit dieser Verfahren ist sehr hoch, die Anwendung ist jedoch auf einfache Geometrien beschränkt. Bei SPH-Methoden ist das Fluidkontinuum mit einer endlichen Anzahl diskreter Partikel (Materialpunkte) approximiert, die der Bewegung des Fluids folgen. Die Bewegungsbeschreibung der Partikel erfolgt in Lagrange'scher Betrachtungsweise. Physikalische Größen und räumliche Ableitungen werden mit Hilfe einer die Punktdarstellung regularisierenden Verteilungsfunktion (Kernel-Funktion) interpoliert. Vorteile bietet das Verfahren bei Strömungen mit freien Oberflächen oder bei Mehrfluidströmungen, während die Genauigkeit im Vergleich mit anderen Diskretisierungsverfahren bei vergleichbarem Rechenaufwand

geringer ist und die mathematische Fundierung des Verfahrens fehlt. Bei Gittergas-Methoden sind Fluide als Ensemble von – auf einem Berechnungsgitter angeordneten – wechselwirkenden mesoskopischen Partikelpaketen betrachtet. Die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der statistischen Verteilung der Partikelpakete im geometrischen und im Geschwindigkeitsraum erfolgt auf Basis der Boltzmann-Gleichung der kinetischen Gastheorie, wobei der Kollisionsterm der Boltzmann-Gleichung vereinfacht ist und lediglich eine endliche Anzahl von Bewegungszuständen erlaubt. Mit normierten Zellgrößen und Partikelmassen folgen makroskopische Größen aus den mit den Verteilungsfunktionen gewichteten mesoskopischen Größen. Vorteile bietet die Methode bei der Umsetzung paralleler Algorithmen und bei komplexen Geometrien. Bei der Modellierung turbulenter Strömungen mit Turbulenzmodellen oder nicht-isothermer Strömungen ist die Methodik jedoch noch nicht so weit entwickelt wie die zur Lösung der Navier-Stokes- und Reynolds-Gleichungen eingesetzten etablierten Diskretisierungsverfahren.

Im Rahmen dieser Arbeit ist die Raum-Zeit-Finite-Element-Methode zur Diskretisierung der Modellgleichungen gewählt. Besonders geeignet ist das Verfahren für Aufgabenstellungen mit ausgeprägten Wechselwirkungen zwischen Strömungen und darin eingebetteten Strukturen. Die einheitliche Diskretisierung der auf verschiedenen Betrachtungsweisen begründeten Modellgleichungen der Teilkontinua bietet ideale Voraussetzungen für numerische Analysen der stark gekoppelten Teilsysteme. Aber auch für Aufgabenstellungen der Strömungsdynamik von Mehrfluidströmungen mit ortsvariabel lokal un stetigen Lösungsverläufen physikalischer Beschreibungsgrößen bieten Raum-Zeit-Finite-Element-Methoden Vorteile. Bei geeigneter Beschreibung der Dynamik bewegter Unstetigkeitsflächen (Grenzflächen) ist die einfache Lageermittlung der Flächen und der davon geschnittenen Elemente zu jedem Zeitpunkt möglich. Darauf aufbauend bieten lokale Partition-of-Unity Finite-Element-Techniken [16, 100] mit a priori Wissen über die Verläufe von Lösungsunstetigkeiten die Möglichkeit der Konstruktion konsistent angepasster Ansatzräume des Lösungsverfahrens in Raum und Zeit.

2.2.1 Raum-Zeit-Finite-Element-Methode

Die Lösung dynamischer Modellgleichungen erfolgt üblicherweise mit semidiskreten Formulierungen, bei denen zwischen Orts- und Zeitdiskretisierung unterschieden wird und getrennte Näherungsoperatoren für Raum und Zeit Verwendung finden. Im Rahmen der Raum-Zeit-Finite-Element-Methode (RZ-FEM) ist diese Unterscheidung aufgehoben, da die schwache Form der Modellgleichungen in Raum und Zeit einheitlich mit der Finite-Element-Methode gelöst wird.

Im Bereich der Fluid-Struktur-Wechselwirkung können die stark gekoppelten Fluid- und Strukturmodellgleichungen simultan gelöst werden. Für die der Strukturbewegung folgenden bewegten Fluidnetze ist die RZ-FEM dabei besonders geeignet, da die Möglichkeit isoparametrischer Elemente die natürliche Beschreibung der Verformung von Fluidelementen in Zeitrichtung ermöglicht. Mit exakt integrierten Modellgleichungen in isoparametrischen Raum-Zeit-Elementen ist die bei allgemeinen Lagrange-Euler (ALE) Formulierungen zusätzlich zu berücksichtigende geometrische Bilanzgleichung (geometric conservation law) automatisch erfüllt. Damit ist mindestens sichergestellt, dass stationäre Strömungszustände unabhängig von beliebigen Netzbewegungen zu jedem Zeitpunkt unverändert bleiben.

Aber auch zur Lösung von Aufgabenstellungen mit instationären Mehrphasenströmungen auf unbewegten Netzen bietet sich die RZ-FEM an. Die konsistente Diskretisierung aller Modellgleichungen in Raum und Zeit ermöglicht bei entsprechender Grenzflächenmodellierung die Identifizierung des geometrischen Ortes von Phasengrenzflächen zu jedem Zeitpunkt des betrachteten Zeitintervalls. Anhand der interpolierten Lage von Grenzflächen in Raum-Zeit-Elementen erfolgt dann die Unterteilung der Elemente in Elementteilgebiete. Dies dient sowohl der exakten Integration über die von verschiedenen Materialien belegten Teilgebiete des Elementes als auch der Auswertung von Übergangsbedingungen auf der diskret im Element vorliegenden Kontaktfläche. Bei Verwendung erweiterter oder generalisierter FE-Methoden [16] mit knotenspezifisch erweiterten Ansatzräumen im Bereich von Grenzflächen erlaubt die RZ-FEM die einfache Identifikation aller Knoten mit zu erweiternden Ansatzfunktionen, auch bei einem räumlichen Wechsel der Grenzflächenlage über mehrere Elemente in einem Zeitschritt [85].

Die räumlichen Gebiete Ω_t aller Konfigurationen eines betrachteten Zeitintervalls $I = (t_a, t_e)$, $t_a \leq t \leq t_e$, bilden das Raum-Zeit-Gebiet $Q = \Omega_t \times I$, für das die Modellgleichungen des Systems zu lösen sind. Die Diskretisierung des gesamten Raum-Zeit-Gebietes führt bei realitätsnahen Aufgabenstellungen jedoch zu vielfach größeren Gleichungssystemen als die alleinige Diskretisierung räumlicher Gebiete, wie bei semidiskreten Formulierungen.

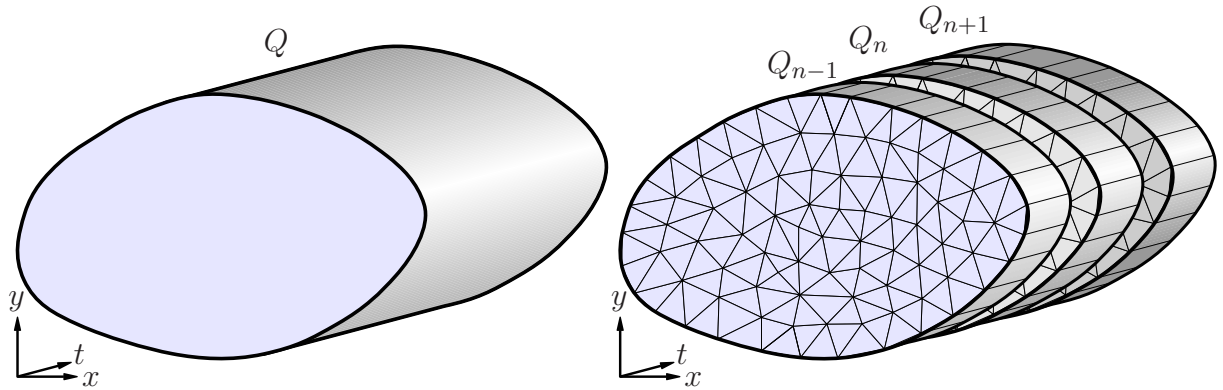


Bild 2.4: Raum-Zeit-Gebiet Q , Diskretisierung mit finiten Raum-Zeit-Elementen.

Deshalb wird das betrachtete Zeitintervall I in Subintervalle $I_n = (t_n, t_{n+1})$ aufgeteilt, wie in Bild 2.4 schematisch für den zweidimensionalen Raum gezeigt. Die sequentielle Diskretisierung und Lösung der Modellgleichungen in den als Raum-Zeit-Scheiben $Q_n = \Omega_t \times I_n$ bezeichneten Raum-Zeit-Gebieten der Subintervalle führt auf eine effiziente Diskretisierung mit deutlich weniger Freiwerten im Gleichungssystem. Raum-Zeit-Ränder im Subintervall sind mit $P_n = \Gamma_t \times I_n$ bezeichnet und raumzeitliche Grenzflächen mit $R_n = \Sigma_t \times I_n$.

Approximation physikalischer Beschreibungsgrößen. Im Gebiet Q_n und auf den Rändern P_n der Raum-Zeit-Scheibe wird die geordnete Menge \mathcal{N}^{std} der Knoten k der Raum-Zeit-Diskretisierung definiert. Mit knotenweise gewählten, stückweise stetig differenzierbaren Ansatzfunktionen $N_k(\mathbf{x}, t)$ folgt der Ansatzraum \mathcal{V}_{std} der Raum-Zeit-Finite-Element-Approximation,

$$\mathcal{V}_{\text{std}} = \bigcup_{k \in \mathcal{N}^{\text{std}}} N_k(\mathbf{x}, t) \quad . \quad (2.44)$$

Die in den Abschnitten 3.3 und 3.4 verwendete Knotenmenge $\mathcal{N} \subset \mathcal{N}^{\text{std}}$ bezieht sich lediglich auf räumliche Diskretisierungen zu einem festgelegten Zeitpunkt t , $t_a \leq t \leq t_e$. Der Ansatzraum \mathcal{V}_{std} spannt den Funktionenraum abschnittsweise stetiger Polynome einer festgelegten Ordnung auf, mit deren Linearkombinationen die Approximation $u_{\text{std}}^h(\mathbf{x}, t)$ des Verlaufes einer physikalischen Beschreibungsgröße $u(\mathbf{x}, t)$ in Raum und Zeit formuliert ist,

$$u_{\text{std}}^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{k \in \mathcal{N}^{\text{std}}} N_k(\mathbf{x}, t) \hat{u}_k \quad . \quad (2.45)$$

Die Knotenfreiwerte \hat{u}_k skalieren die jeweiligen Anteile der Ansatzfunktionen an der Gesamtlösung und sind die Bestimmungsvariablen des Verfahrens.

2.2.2 Zeitdiskontinuierliches Galerkin-Verfahren

Verfahren, bei denen Zeitverläufe zeitveränderlicher Zustandsvariablen innerhalb einer Raum-Zeit-Scheibe mit Polynomansätzen stetig approximiert und gewichtet sind, heißen Galerkin-Zeitintegrationsverfahren. Sie lassen sich anhand der C_0 -Stetigkeit der Zustandsvariablen über Zeitintervallgrenzen hinweg in zeitkontinuierliche und zeitdiskontinuierliche Galerkin-Verfahren unterteilen.

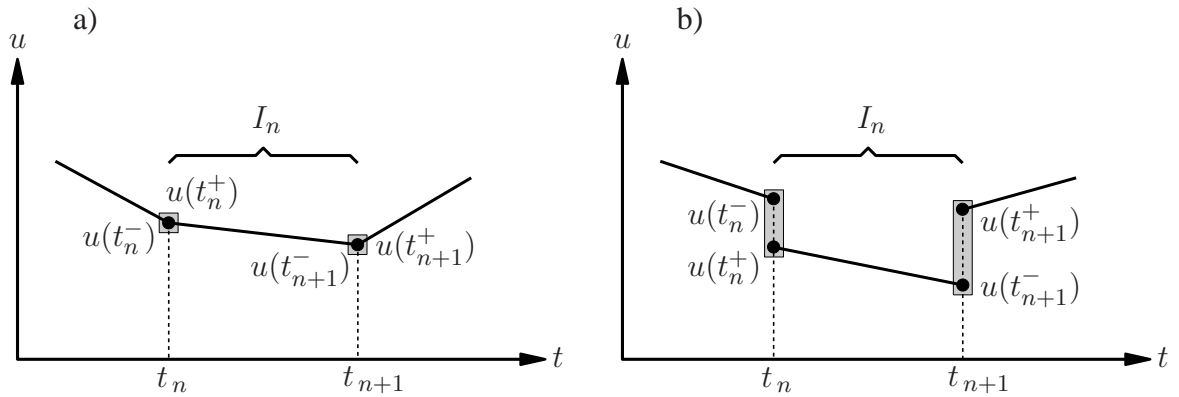


Bild 2.5: Galerkin-Zeitintegrationsverfahren: a) zeitkontinuierlich, b) zeitdiskontinuierlich.

Bild 2.5 zeigt die mit linearen Polynomansätzen im Zeitintervall I_n und in den benachbarten Zeitintervallen $I_{n\pm 1}$ approximierte Zustandsvariable $u(t)$. Die C_0 -Stetigkeit über Zeitintervallgrenzen zum Zeitpunkt t_n ist mit

$$\llbracket u \rrbracket_n = u(t_n^+) - u(t_n^-) = 0 \quad (2.46)$$

gefordert. Bei zeitkontinuierlichen Galerkin-Verfahren ist (2.46) stark erfüllt, d. h. die Werte zu Beginn eines Zeitintervalls sind bekannt und gehen auf der rechten Seite des zu lösenden Gleichungssystems ein, siehe Bild 2.5 a). Damit stellt das zeitkontinuierliche Galerkin-Verfahren eine Petrov-Galerkin-Formulierung in der Zeit dar, wenn der Polynomgrad zur Zeitapproximation der Wichtungsfunktionen um Eins niedriger ist als der Polynomgrad zur Zeitapproximation der Zustandsvariablen [45, 88]. Bei zeitdiskontinuierlichen Galerkin-Verfahren hingegen wird (2.46) als Sprungterm

$$+ \int_{\Omega_n} \delta u(t_n^+) \cdot a \llbracket u \rrbracket_n \, d\Omega \quad (2.47)$$

zur schwachen Form der Modellgleichungen hinzugefügt. Dadurch sind die Werte $u(t_n^+)$ zu Beginn des Zeitintervalls I_n unbekannt, wie Bild 2.5 b) zeigt. Der Faktor a in (2.47) dient der Einheitenkonsistenz sowie der Wichtung des Sprungterms. Die Zustandsvariablen weisen an Zeitintervallgrenzen endliche Sprünge auf, die bei adaptiver Zeitschrittweitensteuerung als Maß für den zeitlichen Diskretisierungsfehler herangezogen werden können [47]. Die Polynomgrade zur Zeitapproximation von Wichtungsfunktionen und Zustandsvariablen sind gleich, so dass zeitdiskontinuierliche Galerkin-Verfahren auf Bubnov-Galerkin-Formulierungen in der Zeit führen. Ein wesentlicher Nachteil diskontinuierlicher Galerkin-Zeitintegrationsverfahren besteht in der erhöhten Anzahl der Freiwerte, wenn die Zustandsvariablen zu Beginn einer Raum-Zeit-Scheibe unbekannt sind. Vorteilhaft hingegen ist, dass die Genauigkeitsordnung diskontinuierlicher Zeitintegratoren um Eins höher ist als die kontinuierlicher Zeitintegratoren. Darüber hinaus ist die Verwendung unterschiedlicher Diskretisierungen in benachbarten Raum-Zeit-Scheiben möglich. An die erforderlichen Projektionsalgorithmen wird lediglich die Forderung gestellt, die Stetigkeit der Beschreibungsgrößen in den Sprungtermen (2.47) schwach zu erfüllen. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete zeitdiskontinuierliche Galerkin-Verfahren mit linearen Ansätzen für alle Zustandsvariablen in Zeitrichtung führt auf ein implizites und für lineare Differentialgleichungen A-stabiles Zeitintegrationsverfahren der Genauigkeitsordnung $O(\Delta t^3)$.

2.2.3 Ansätze im Element

Zur Approximation der unbekannten Feldgrößen wird das betrachtete räumliche Gebiet in endlich große, polygonal berandete Teilgebiete – die finiten Elemente – zerlegt. Die geometrischen Grundformen finiter Elemente beschränken sich bei Aufgabenstellungen in zwei Raumdimensionen im Wesentlichen auf Drei- und Vierecke. Zwei verschiedene Elemente $e_i, e_j, i \neq j$ eines FEM-Netzes sind bei Beschränkung auf konforme Netze bezüglich der Menge ihrer Randpunkte entweder disjunkt oder besitzen eine gemeinsame Kante oder einen gemeinsamen Eckpunkt.

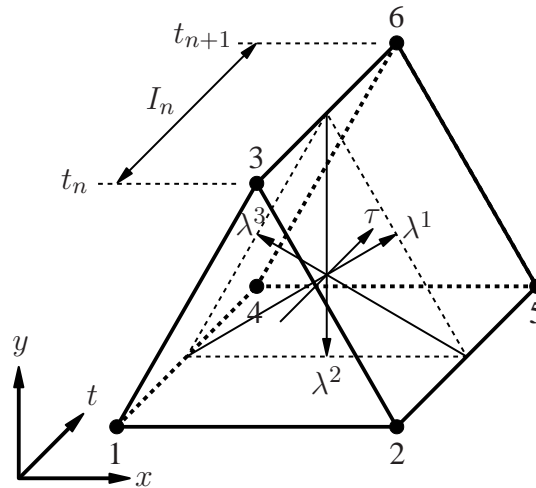


Bild 2.6: Lokales und globales Koordinatensystem im 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelement.

Im Rahmen dieser Arbeit sind die unbekannten Feldgrößen im zweidimensionalen Raum im Wesentlichen mit kantenlinearen Polynomansätzen und Dreieckelementen approximiert. Die

Beibehaltung der Dreieckform in Zeitrichtung sowie die Verwendung kantenlinearer Zeitansätze führt auf das in Bild 2.6 dargestellte 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelement. Die Transformation zwischen den lokalen Raumkoordinaten $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda^1 \lambda^2 \lambda^3]^T$, der lokalen Zeitkoordinate τ und den globalen x - y -Koordinaten erfolgt mit dem Geometrieansatz im Element,

$$\begin{bmatrix} x(\boldsymbol{\lambda}, \tau) \\ y(\boldsymbol{\lambda}, \tau) \end{bmatrix}_e = \sum_{k=1}^6 M_k(\boldsymbol{\lambda}, \tau) \begin{bmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{bmatrix}_k, \quad 0 \leq \lambda^1, \lambda^2, \lambda^3 \leq 1 \quad . \quad (2.48)$$

Darin sind $M_k(\boldsymbol{\lambda}, \tau)$ die knotenweise definierten Formfunktionen und $(\hat{x}, \hat{y})_k$ die globalen Knotenkoordinaten des Elementes. Die Richtung der globalen Zeitkoordinate t ist orthogonal zu den Richtungen der lokalen Raumkoordinaten $\boldsymbol{\lambda}$ und entsprechend mit der lokalen Zeitkoordinate τ im Element eindeutig bestimmt,

$$t(\tau) = \frac{1}{2}(1 - \tau)t_n + \frac{1}{2}(1 + \tau)t_{n+1} \quad , \quad -1 \leq \tau \leq 1 \quad . \quad (2.49)$$

Die Approximation einer beliebigen physikalischen Größe u im Element erfolgt mit

$$u_e^h(\boldsymbol{\lambda}, \tau) = \sum_{k=1}^6 N_k(\boldsymbol{\lambda}, \tau) \hat{u}_k \quad . \quad (2.50)$$

Darin sind $N_k(\boldsymbol{\lambda}, \tau)$ knotenweise definierte lineare Lagrange-Polynomansätze, die für Elemente prismatischer Grundform der Standardliteratur zur FEM, z. B. [165], entnommen werden können und \hat{u}_k die zu bestimmenden diskreten Knotenfreiwerte. Partielle Ableitungen physikalischer Größen folgen mit Differentiation der lokal definierten Ansätze nach den globalen Koordinaten unter Anwendung der Kettenregel. Im Rahmen des in dieser Arbeit verwendeten isoparametrischen Elementkonzeptes sind die Formfunktionen des Geometrieansatzes gleich den Ansatzfunktionen zur Approximation physikalischer Zustandsvariablen gewählt.

2.2.4 Stabilisierung

Konventionelle Finite-Element-Methoden sind als Bubnov-Galerkin-Formulierungen insbesondere zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen mit dominierendem elliptischen Differentialoperator der Ordnung Zwei geeignet. Dieser Typ von Differentialgleichung tritt in der Regel bei Aufgabenstellungen auf, bei denen sich Anfangsinformationen und Störungen der Lösung mit unbegrenzter Geschwindigkeit im betrachteten Gebiet ausbreiten. Beispielhaft seien die Poisson-Gleichung, die Laplace-Gleichung und die Modellgleichungen der Elastostatik genannt. Bei Aufgabenstellungen mit dominierendem hyperbolischen Charakter der Differentialgleichung, wie z. B. bei Wellenausbreitungsphänomenen oder bei konvektionsdominierten Strömungen, existieren ausgezeichnete Richtungen, entlang derer sich Informationen mit endlicher Geschwindigkeit ausbreiten. Bubnov-Galerkin-Formulierungen sind dafür oftmals ungeeignet, da der richtungsabhängige Informationsfluss nicht berücksichtigt ist. Stabilisierte Verfahren auf Basis von Petrov-Galerkin-Formulierungen hingegen eröffnen die Möglichkeit, die Richtung der Informationsausbreitung mit zweckmäßig gewählten Wichtungsfunktionen zu berücksichtigen. Das von Brooks & Hughes [22] für konvektionsdominierte Aufgabenstellungen

vorgestellte Streamline-Upwind Petrov-Galerkin-Verfahren (SUPG) folgt, wenn der konventionellen Wichtungsfunktion der mit einem geeignet gewählten Stabilisierungsfaktor gewichtete konvektive Term des Differentialoperators hinzugefügt wird. Dies führt zur richtungsabhängigen Wichtung von Informationen, ähnlich dem Upwinding bei Finite-Differenzen-Approximationen, und darüber hinaus zur Beibehaltung von Konsistenz und Genauigkeit des ursprünglichen Verfahrens.

Galerkin-Verfahren mit Nebenbedingungen in Form Lagrange'scher Multiplikatoren heißen gemischte Formulierungen und führen häufig auf Sattelpunktprobleme. Diese treten insbesondere bei Aufgabenstellungen mit nahezu inkompressiblen Medien auf. Numerisch stabile Lösungen gemischter Formulierungen im Rahmen von FE-Berechnungen erfordern aufeinander abgestimmte Ansatzordnungen der Ansätze von Beschreibungsgrößen und Lagrange-Multiplikatoren entsprechend den Forderungen der Babuška-Brezzi-Bedingung [10, 20]. Dies führt, speziell bei Aufgabenstellungen mit unterschiedlichen Ableitungsordnungen der zu approximierenden Größen, zu Kombinationen von Ansatzordnungen, die hinsichtlich der Effizienz numerischer Berechnungen nicht optimal sind. Ähnlich wie bei SUPG-Verfahren eignen sich Petrov-Galerkin-Formulierungen ebenso zur Konstruktion stabilisierter gemischter FE-Methoden mit beliebig wählbaren Ansatzordnungen ohne Erfüllung der Babuška-Brezzi-Bedingung. Im Rahmen des Pressure-Stabilized Petrov-Galerkin-Verfahrens (PSPG) demonstrieren Hughes et al. [73] das Vorgehen anhand des Modellproblems der Stokes-Gleichung, indem der mit einem geeignet gewählten Stabilisierungsfaktor gewichtete Druckterm des Differentialoperators zur Wichtungsfunktion der schwachen Form hinzugefügt wird. Damit sind im Rahmen gemischter Verfahren Polynome gleicher Ansatzordnung für alle zu approximierenden Größen wählbar.

Die Verallgemeinerung von SUPG- und PSPG-Stabilisierungen führt auf Galerkin / Least-Squares-Stabilisierungen (GLS) [74], bei denen anstatt einzelner Terme der gesamte, mit einem geeigneten Stabilisierungsfaktor gewichtete Differentialoperator im Sinne einer Least-Squares-Formulierung zur Wichtungsfunktion der schwachen Form hinzugefügt wird. Die Wahl der wichtenden Stabilisierungsfaktoren hat wesentlichen Einfluss auf die Genauigkeit der numerischen Lösung. Für Aufgabenstellungen mit mehr als einer räumlichen Dimension lassen sich diese jedoch nicht exakt angeben. Dementsprechend sind derzeitige Forschungen auf dem Gebiet stabilisierter Verfahren darauf ausgerichtet, die grundlegenden physikalischen und mathematischen Zusammenhänge zu verstehen und darauf aufbauend parameterfreie Methoden zu entwickeln. So erweitern z. B. Franca & Russo [48] den Funktionenraum einer Galerkin-Formulierung um speziell konstruierte residuen-freie Blasenfunktionen, die nach statischer Kondensation auf eine Formulierung führt, die stabilisierten FE-Methoden äquivalent ist.

Hughes [72] entwickelt einen physikalisch motivierten variationellen Mehrskalenansatz, bei dem Effekte von nicht auflösbaren feinen Skalen auf den aufgelösten groben Skalen der FEM mittels Green'scher Feinskalen-Funktionen berücksichtigt sind. Darüber hinaus zeigt er, dass stabilisierte Verfahren als Approximation der nicht auflösbaren feinskaligen Lösung deubar sind. Die Äquivalenz von Verfahren mit residuen-freien Blasenfunktionen und variationellem Mehrskalenansatz zeigen Brezzi et al. in [21]. Andere Ansätze verfolgen z. B. Tezduyar & Osa-wa [155], die Stabilisierungsfaktoren aus den Matrix- und Vektornormen verschiedener relevanter Elementuntermatrizen und -vektoren ermitteln.

3. Grenzflächendynamik

Mit den Modellgleichungen sowie den Rand-, Anfangs- und Übergangsbedingungen in Kapitel 2 sind die physikalischen Prozesse im Beobachtungsgebiet, auf Gebietsrändern und auf Grenzflächen vollständig beschrieben. In Euler'scher Betrachtung stehen dabei jedoch a priori keine Informationen über die zeitveränderliche Geometrie von Teilgebieten und Grenzflächen zur Verfügung. Da aber gerade Aufgabenstellungen mit oberflächengekoppelten Teilkontinua die Kenntnis der zeitveränderlichen Lage gebietstrennender Grenzflächen als geometrischem Ort zum Einbringen von Übergangsbedingungen und zur Abgrenzung verschiedener Materialien mit teilweise ausgeprägt unterschiedlichen Materialkenngrößen erfordern, sind zusätzliche Modellansätze zur Beschreibung der Grenzflächendynamik notwendig. Darüber hinaus können in Abhängigkeit von den zu beschreibenden physikalischen Phänomenen auch geometrische Größen wie Orientierung und Krümmung der Grenzfläche in die Übergangsbedingungen einfließen. Entsprechend sind diese zur Modellierung des Systemverhaltens ebenfalls zu ermitteln.

Das folgende Kapitel widmet sich der Dynamik sowie der Ermittlung von Geometrieigenschaften bewegter Grenzflächen. Dafür sind verschiedene Modelle zur diskreten Beschreibung der Bewegung und Veränderung von Grenzflächen in Abschnitt 3.1 diskutiert und hinsichtlich ihrer Eignung für verschiedene Aufgabenstellungen bewertet. Aufgrund ihrer Flexibilität und der für das Konzept lokal erweiterter Ansatzräume wesentlichen Eigenschaften ist die Level-Set-Methode für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Aufgabenstellungen ausgewählt. Ihre Grundlagen sind in Abschnitt 3.2 vorgestellt, wobei die Bewegungsbeschreibung unter Zuhilfenahme von Abstandsfunktionen und die Diskretisierung mit der Raum-Zeit-FEM im Vordergrund stehen. Zusätzlich sind verschiedene Verfahren zur Ermittlung von Geometrieinformationen, zur Reinitialisierung degenerierter Abstandsfunktionen und zur Verbesserung von Erhaltungseigenschaften diskutiert. Darauf aufbauend erfolgt in Abschnitt 3.3 die Vorstellung verschiedener Reinitialisierungsverfahren und deren Vergleich bezüglich des Lagefehlers und der Volumenerhaltung im Grenzflächennahbereich. Im abschließenden Abschnitt 3.4 sind verschiedene Verfahren zur Ermittlung von Geometrieinformationen betrachtet und bezüglich des Einheitsnormalenvektor- und des Krümmungsfehlers auf regelmäßigen und gestörten Netzen sowie bei exakter und reinitialisierter Abstandsfunktion miteinander verglichen.

3.1 Anforderungen und Überblick

Bild 3.1 zeigt verschiedene Typen von Grenzflächen. Während die in Bild 3.1 a) dargestellten geschlossenen Grenzflächen Teilgebiete mit verschiedenen Materialien voneinander trennen, sind die in Bild 3.1 b) skizzierten offenen Grenzflächen der geometrische Ort von Singularitäten oder sprunghaften Wechseln der Zustandsgrößen innerhalb eines Gebietes, wie z. B. bei

Stoßwellen in kompressiblen Fluiden. Im Rahmen dieser Arbeit liegt der Fokus auf teilgebiets-trennenden und damit geschlossenen Grenzflächen.

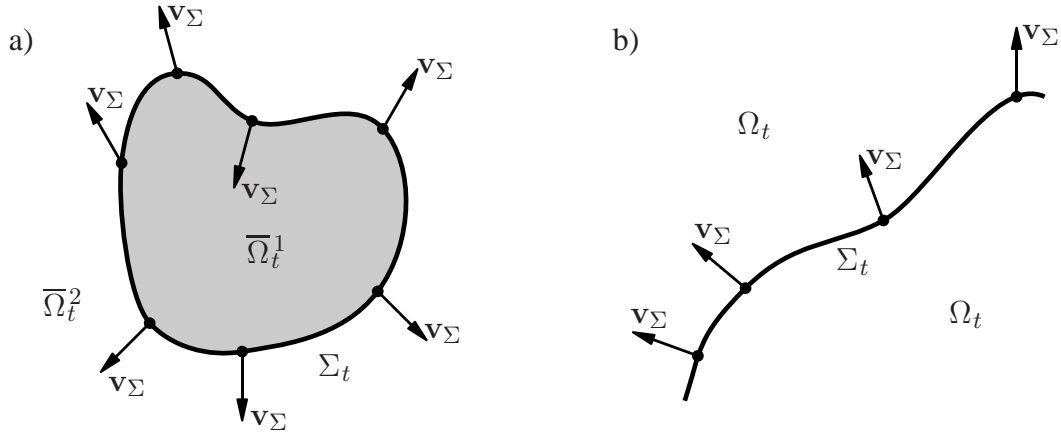


Bild 3.1: Grenzflächentypen: a) geschlossene Grenzflächen, b) offene Grenzflächen.

Die Grenzfläche $\Sigma_t = \bar{\Omega}_t^1 \cap \bar{\Omega}_t^2$ zwischen den geschlossenen räumlichen Teilgebieten $\bar{\Omega}_t^1$ und $\bar{\Omega}_t^2$ zum Zeitpunkt t wird aus den Grenzflächenpunkten $\mathbf{x}_\Sigma = \mathbf{x} \in \Sigma_t$ gebildet. Die Bewegung eines materiellen Grenzflächenpunktes folgt mit der Grenzflächengeschwindigkeit \mathbf{v}_Σ dieses Punktes. Den Zusammenhang zwischen zeitlicher und räumlicher Änderung eines Grenzflächenpunktes sowie dessen Geschwindigkeit gibt die materielle Zeitableitung

$$\frac{D\mathbf{x}_\Sigma}{Dt} = \dot{\mathbf{x}}_\Sigma = \mathbf{v}_\Sigma \quad . \quad (3.1)$$

Numerische Verfahren zur Erfassung der Bewegung von Grenzflächen müssen die Lösung der mit Gleichung (3.1) und entsprechenden Rand- und Anfangsbedingungen gegebenen Aufgabenstellung in geeigneter Weise approximieren. Darüber hinaus sind

- die Ermittlung geometrischer Grenzflächeneigenschaften, wie der Position von Grenzflächenpunkten sowie der Orientierung und der Krümmung der Grenzfläche in diesen Punkten, und
- die Erfassung signifikanter Gestalt- und Formänderungen der Grenzfläche und damit verbunden Vereinigung oder Teilung grenzflächenseitiger Teilgebiete

wesentliche Teilaufgaben dieser Verfahren. Die gängigen Methoden unterscheiden sich konzeptionell teilweise deutlich und sind im Wesentlichen hinsichtlich des Lösungsansatzes von Gleichung (3.1) in explizite und implizite Verfahren einteilbar. Während die Position der Grenzfläche bei expliziten Verfahren direkt mit Lösung von (3.1) ermittelt wird (front/interface tracking), gründen implizite Verfahren auf gebietsweit definierten Hilfsgrößen, mit denen (3.1) implizit gelöst und die Geometrie der Grenzfläche rekonstruiert wird (front/interface capturing).

3.1.1 Explizite Verfahren

Im Rahmen expliziter Verfahren sind Grenzflächen in parametrischer Form dargestellt. Die unendliche Anzahl von Grenzflächenpunkten ist mit einer endlichen Anzahl diskreter Punkte

approximiert. Verbreitete Verfahren sind u. a. Finite-Element-Methoden mit bewegten Netzen, Bild 3.2 a), Markerpartikelmethoden, Bild 3.2 b), und Randintegralmethoden, Bild 3.2 c).

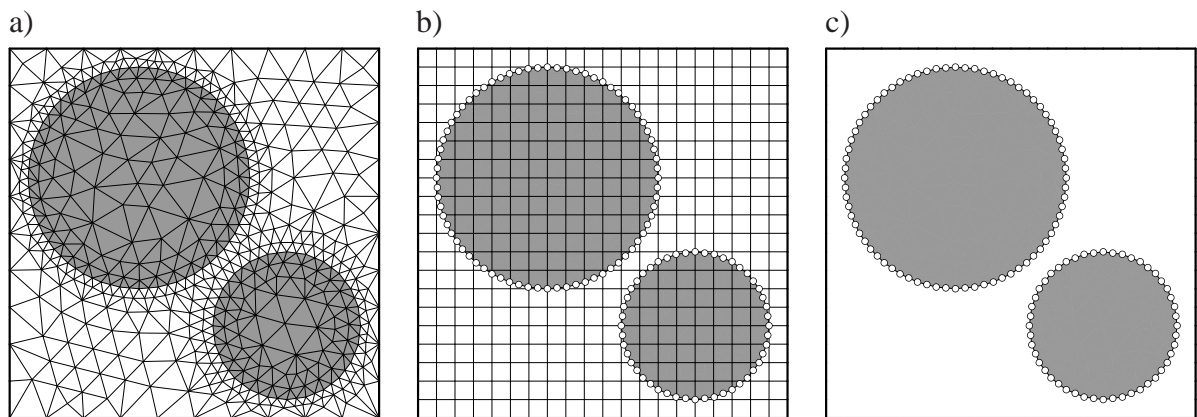


Bild 3.2: Explizite Verfahren: a) Bewegte Netze, b) Markerpartikel, c) Randintegralmethoden.

Bewegte Netze. Bei den in Bild 3.2 a) skizzierten Finite-Element-Methoden mit bewegten Netzen sind die Modellgleichungen im Raum derart diskretisiert, dass Knoten des Berechnungsnetzes mit diskreten Punkten auf der Grenzfläche übereinstimmen. Die gemeinsamen Ränder von Teilgebieten sind als Teil der Ortsdiskretisierung mit den gewählten Geometrieansätzen polygonal approximiert, wodurch die zeitveränderliche Position von Grenzflächen Teil der Gesamtlösung ist. Damit sind Materialien mit unterschiedlichen Materialkenngrößen beidseitig der Grenzfläche „scharf“ voneinander getrennt. Es ergeben sich Vorteile beim Einbringen von Übergangsbedingungen, da der Informationsaustausch zwischen verschiedenen Gebieten in natürlicher Weise dem Einbringen von Randbedingungen entspricht. Notwendige Geometrieinformationen lassen sich direkt aus der explizit vorliegenden Grenzflächenlage ableiten.

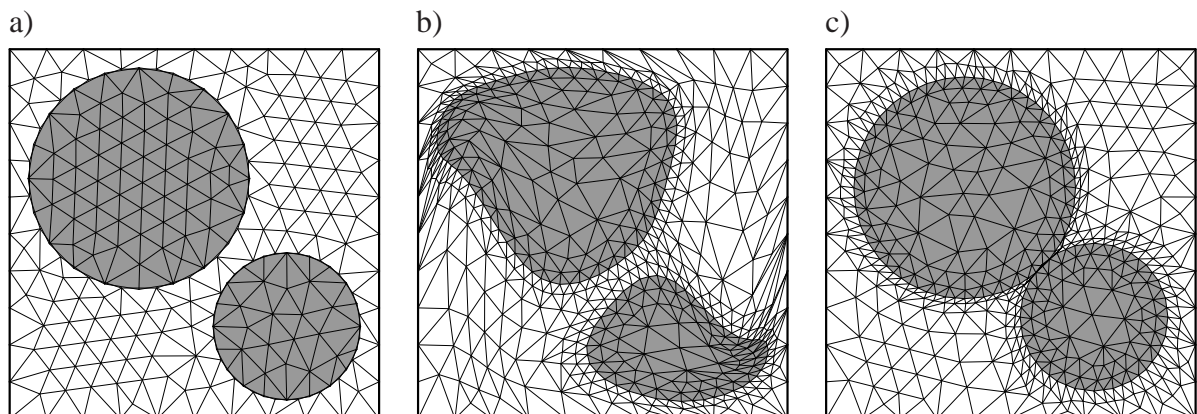


Bild 3.3: Bewegte Netze: a) Nichtkonforme Netze, b), c) Struktur- und Gestaltänderungen.

Auch unabhängige Ortsdiskretisierungen der grenzflächenseitigen Gebiete sind möglich, führen jedoch zu nichtkonformen Netzen auf Grenzflächen, wie in Bild 3.3 a) dargestellt. Dadurch erhöht sich einerseits der numerische Aufwand bei der Interpolation physikalischer Beschreibungsvariablen auf gemeinsamen Gebietsrändern und andererseits sind Klaffungen und Überschneidungen von Teilgebieten zu minimieren. Bild 3.3 b) zeigt, dass bei total Lagrange'scher Betrachtung schon kleine Gestaltänderungen der betrachteten Teilgebiete zu entarteten bzw.

sich überdeckenden Elementen der Ortsdiskretisierung führen können, auch wenn die Grenzflächentopologie sich nur unwesentlich ändert. Zur Vermeidung der damit notwendigen Neuvernetzung des Berechnungsgebietes bieten sich unabhängige Netzbewegungsalgorithmen im Rahmen von z. B. ALE-Formulierungen [65] oder ähnlichen Verfahren wie der Raum-Zeit-FEM [154] an. Wie in Bild 3.3 c) dargestellt, sind bei ausgeprägten Struktur- und Gestaltänderungen von Grenzflächen sowie bei Vereinigung oder Trennung von Teilgebieten Neuvernetzungsstrategien erforderlich, die insbesondere bei Aufgabenstellungen in drei Raumdimensionen hohen algorithmischen Aufwand erfordern [83, 99]. Zusätzliche Fehler resultieren aus Lösungsprojektionen von der alten auf die neue Ortsdiskretisierung.

Markerpartikel. Die in Bild 3.2 b) skizzierten Markerpartikelmethoden werden dann eingesetzt, wenn die explizite Beschreibung von Grenzflächenbewegungen unabhängig von der Ortsdiskretisierung erfolgen soll [55, 158]. Im Rahmen dieser Verfahren sind lediglich die Grenzflächenpunkte parametrisiert und mit einer endlichen Anzahl diskreter Punkte, den Markerpartikeln, approximiert. Unabhängig davon werden die Gebietsmodellgleichungen auf ortsfesten strukturierten Netzen diskretisiert und gelöst. Die Interpolation der Geschwindigkeitslösung von der Ortsdiskretisierung auf die diskret betrachteten Grenzflächenpunkte ermöglicht dann ausgehend von Gleichung (3.1) die explizite Bestimmung der Bahnlinien der betrachteten Partikel. Werden benachbarte Markerpartikel mit Polynomsegmenten verbunden, entsteht ein Netz, das die Grenzflächenlage bei entsprechender Partikelanzahl auch unterhalb der Längenskalen der zugrunde liegenden Ortsdiskretisierung mit hoher Genauigkeit approximiert. Damit lassen sich neben der Grenzflächenlage weitere geometrische Grenzflächeneigenschaften wie Normale und Krümmung zu jedem Zeitpunkt explizit ableiten. Die Lösung der Gebietsmodellgleichungen erfordert jedoch die Glättung grenzflächenunstetiger Materialkenngrößen über mehrere Zellen des Berechnungsnetzes, wie in Bild 3.4 a) angedeutet. Darüber hinaus sind geeignete Algorithmen für den Informationsaustausch zwischen bewegter Grenzfläche und ortsfestem Gebietsnetz bereitzustellen, speziell bei Aufgabenstellungen mit dominierenden Oberflächenspannungsphänomenen [46].

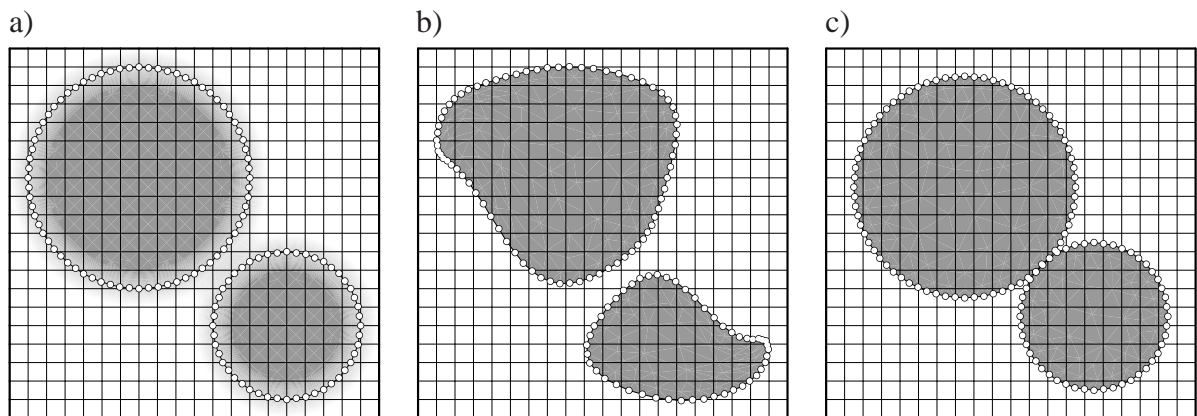


Bild 3.4: Markerpartikel: a) Glättung von Materialparametern, b), c) Struktur- und Gestaltänderungen.

Bild 3.4 b) zeigt, dass schon bei geringen Lageänderungen bewegter Grenzflächen Bereiche mit gehäufte sowie mit geringerer Partikelanzahl auftreten. Die Aufrechterhaltung der Lösungsgenauigkeit erfordert das Entfernen oder Hinzufügen von Partikeln, wobei sich jedoch die Partikelkonnektivität ändert. Bei Verwendung von Grenzflächennetzen sind entsprechende

Neuernetzungen der Grenzfläche vorzunehmen. Ähnliche Neuernetzungsstrategien sind anzuwenden, wenn sich Teilgebiete trennen oder vereinigen, siehe Bild 3.4 c). Der numerische Aufwand dafür ist erheblich, insbesondere bei Aufgabenstellungen in drei Raumdimensionen. Darüber hinaus geht die Lösungsprojektion zwischen verschiedenen Grenzflächennetzen mit zusätzlichen numerischen Fehlern einher.

Randintegralmethoden. Bei den in Bild 3.2 c) skizzierten Randintegralmethoden sind die Gebietsmodellgleichungen auf den gemeinsamen Gebietsrand der Teilgebiete projiziert. Damit ist die Ortsdiskretisierung auf die Grenzfläche beschränkt, wodurch eine erhebliche Reduzierung des numerischen Aufwandes zur Lösung des entstehenden Gleichungssystems erreicht werden kann. Die Anwendung von Randintegralmethoden eignet sich speziell zur Berechnung von Aufgabenstellungen mit linearen Gebietsmodellgleichungen, wie z. B. bei Potentialströmungen [67] oder Stokes-Strömungen [125]. Dabei weisen die errechneten Lösungen eine hohe Genauigkeit auf. Für allgemeinere Strömungssituationen, die in den jeweiligen Teilgebieten z. B. mit den Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide beschrieben sind, ist die Anwendung dieser Verfahren jedoch schwierig [19]. Zudem sind auch bei Randintegralmethoden Neuernetzungen des Grenzflächennetzes vorzunehmen, wenn die Lösungsgenauigkeit nicht mehr gewährleistet ist oder Topologieänderungen von Teilgebieten und Grenzflächen zu berücksichtigen sind.

3.1.2 Implizite Verfahren

Im Rahmen impliziter Verfahren sind Hilfsgrößen im Berechnungsgebiet definiert, mit deren Hilfe die Zuordnung von Raumpunkten zu den durch Grenzflächen voneinander getrennten Teilgebieten erfolgt. Mit Transportgleichungen ist die zeitliche Entwicklung von Hilfsgrößen und damit implizit die Form- und Lageänderung der Teilgebiete beschrieben. Als Hilfsgrößen im Gebiet werden z. B. masselose Markerpartikel, Bild 3.5 a), skalare Fraktionsfunktionen, Bild 3.5 b), oder skalare Level-Set-Funktionen, Bild 3.5 c), verwendet.

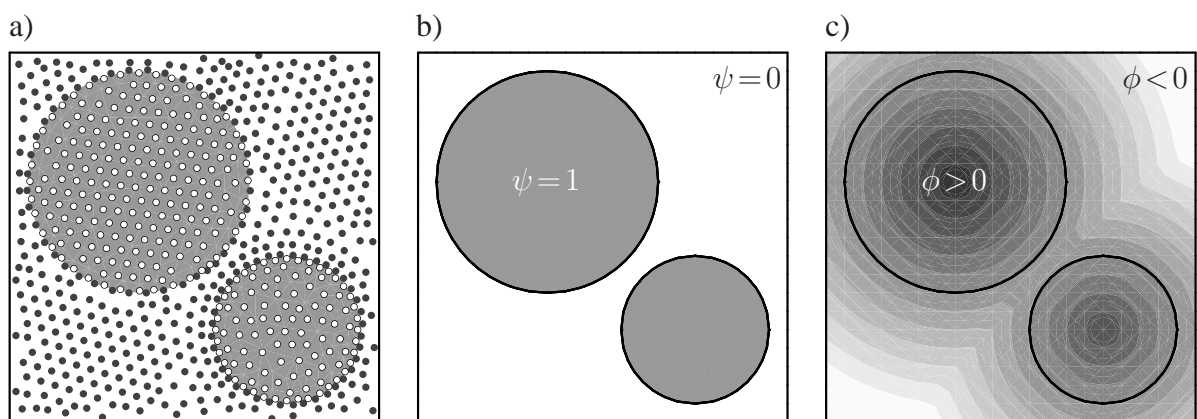


Bild 3.5: Implizite Verfahren: a) Markerpartikel, b) Fraktionsfunktionen, c) Level-Set-Funktionen.

Marker-and-Cell. Ein frühes Verfahren zur Berechnung inkompressibler Fluide mit freien Oberflächen oder von interagierenden inkompressiblen Fluiden ist die in Bild 3.5 a) skizzierte Marker-and-Cell-Methode (MAC) nach Harlow & Welch [62]. Bei diesem Verfahren sind

die Fluidteilgebiete mittels masseloser, im Berechnungsgebiet verteilter Markerpartikel identifiziert. Die Partikel dienen jedoch lediglich der Positionsbestimmung und tragen im Gegensatz zu z. B. Particle-in-Cell- oder Smoothed-Particle-Hydrodynamics-Verfahren keine weiteren physikalischen Informationen. Die Lösung der Modellgleichungen erfolgt auf ortsfesten Diskretisierungen, während die Bewegung der Teilgebiete mit Hilfe der im vorliegenden Geschwindigkeitsfeld in Lagrange'scher Betrachtung transportierten Partikel erfasst ist. Anhand unterscheidbarer Marker gestattet die Methodik die Erfassung mehrerer Teilgebiete, auch unterhalb der Skalen der Ortsdiskretisierung. Die Geometrieeigenschaften von Grenzflächen sind jedoch nicht erfasst und müssen anhand der Dichteverteilung der Markerpartikel in den Zellen des Berechnungsgebietes rekonstruiert werden. Dabei ist die Approximationsgüte der Grenzflächengeometrie durch die Anzahl an Markern in den entsprechenden Zellen beschränkt. Lokale Ausdünnungen und Häufungen verschlechtern die Lösungsgenauigkeit und erfordern das kontinuierliche Hinzufügen und Entfernen von Partikeln während der Berechnung. Numerische Fehler beim Transport der Marker können zu künstlichen Vermischungen und damit zu unscharfen Grenzflächen führen. Zur Steigerung der Effektivität der Methode bietet es sich an, die Partikeldichte in Grenzflächennähe zu erhöhen und abseits davon zu verringern oder Markerpartikel nur nahe Grenzflächen zu verteilen. Bei Zwei-Fluid-Systemen genügt es, lediglich eine Phase mit Markern zu kennzeichnen. Die numerischen Kosten sowie die genannten Nachteile der Methode führten zur Entwicklung von Verfahren mit nur einer Hilfsgröße im Berechnungsgebiet.

Volume-of-Fluid. Volume-of-Fluid-Methoden (VOF) gründen auf Marker-and-Cell-Methoden und gehen auf die Arbeiten von Noh & Woodward [114] sowie Hirt & Nichols [66] zurück. Bei VOF-Methoden ist anstatt Markerpartikeln lediglich der Skalarwert einer Fraktionsfunktion ψ zur Unterscheidung verschiedener Teilgebiete im Berechnungsgebiet definiert. Innerhalb eines Teilgebietes ist ψ konstant und weist an Grenzflächen zwischen Teilgebieten Sprünge auf. Aufgabenstellungen mit zwei interagierenden Fluiden erfordern die Vorgabe zweier Werte, wofür im Allgemeinen Null und Eins gewählt sind, siehe Bild 3.5 b). Die Bewegung der Teilgebiete ist mit einer Transportgleichung für die Fraktionsfunktion erfasst,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \psi = 0 \quad , \quad (3.2)$$

wobei sowohl Gleichung (3.2) als auch die kontinuumsmechanischen Modellgleichungen auf raumfesten Ortsdiskretisierungen gelöst werden. VOF-Methoden ermöglichen die Erfassung struktureller Veränderungen von Teilgebieten bei gleichzeitiger Erhaltung der Masse, auch bei Aufgabenstellungen in drei Raumdimensionen. Dabei sind jedoch in grenzflächengeschnittenen Zellen lediglich Informationen über die Anteile der jeweiligen Gebiete innerhalb der Zelle vorhanden, siehe Bild 3.6 a). Informationen über die geometrischen Eigenschaften der Grenzfläche (Lage, Orientierung, Krümmung) bleiben nicht erhalten und müssen in einem nachgeschalteten Berechnungsschritt rekonstruiert werden. In zwei Raumdimensionen erfolgt dieser Berechnungsschritt mit Liniensegmenten, die entweder, wie in Bild 3.6 b) dargestellt, an der Orientierung des Berechnungsnetzes ausgerichtet sind oder entsprechend Bild 3.6 c) bei komplexeren Ansätzen auch unabhängig vom Berechnungsnetz orientiert sein können [129]. Dabei ist die Stetigkeit von Liniensegmenten über Netzkanten hinweg jedoch nicht gegeben.

Die geeignete Rekonstruktion von Grenzflächenlage und -krümmung kann bei Aufgabenstellungen in drei Raumdimensionen hochkomplexe Algorithmen erfordern und ist wenig entwickelt für unstrukturierte Netze. Damit ist die diskrete Erfassung geometrieabhängiger Grenz-

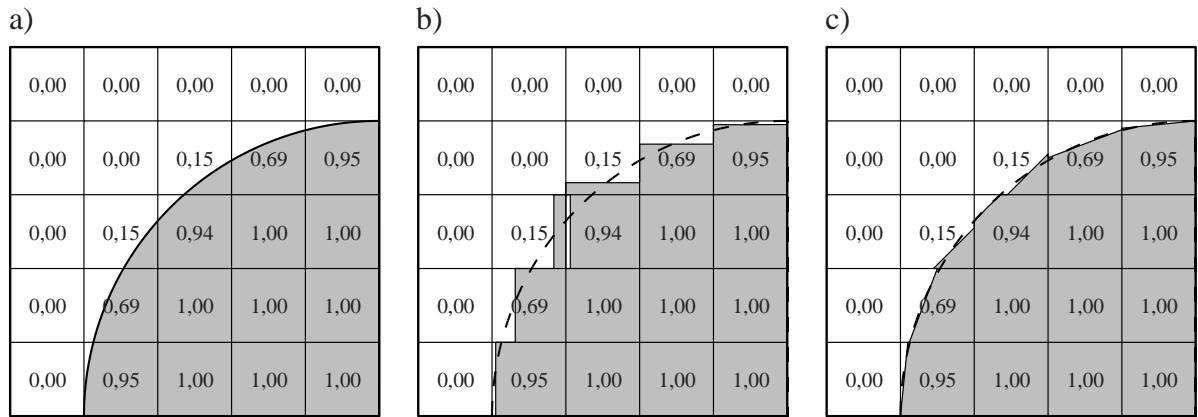


Bild 3.6: Volume-of-Fluid: a) exakte Grenzflächenlage, b), c) rekonstruierte Grenzflächenlage.

flächenquellterme (z. B. bei ausgeprägten Oberflächenspannungsphänomenen) erschwert. Die numerische Lösung der Advektionsgleichung (3.2) ist aufgrund räumlicher Ableitungen der C_0 -unstetigen Fraktionsfunktion mit numerischen Schwierigkeiten verbunden und führt zur Glättung des Grenzflächensprungs von ψ . Zudem erfordert auch die numerische Berechnung der Gebietsmodellgleichungen die Glättung unstetiger Materialkenngrößen und damit die Beschreibung des Kopplungsrandes als unscharfe Grenzfläche.

Level-Set-Methode. Die von Osher & Sethian [116] vorgestellte Level-Set-Methode definiert eine kontinuierliche Funktion ϕ als gebietsweite Hilfsfunktion, mit der Grenzflächen als Isofläche eines festen skalaren Wertes erfasst sind. Damit ist die gewählte Hilfsfunktion anders als beim VOF-Ansatz im Bereich von Grenzflächen C_0/C_1 -stetig (stetig/stetig differenzierbar), siehe Bild 3.5 c). Mit der Wahl vorzeichenbehafteter Abstandsfunktionen als Hilfsgrößen ist der geometrische Ort von teilgebietstrennenden Grenzflächen gleich dem Nullniveau der Hilfsfunktion, während grenzflächenseitige Materialien über das Vorzeichen identifizierbar sind. Die Bewegungsbeschreibung erfolgt mit einer Transportgleichung, die auf raumfesten Ortsdiskretisierungen mit der Geschwindigkeitslösung der physikalischen Modellgleichungen gelöst wird. Strukturelle Veränderungen von Teilgebieten sind ohne numerischen Mehraufwand erfasst und auch geometrische Grenzflächeneigenschaften lassen sich einfach aus der Hilfsfunktion ermitteln. Im Gegensatz zum VOF-Ansatz ist jedoch die Massenerhaltung der Materialien in den betrachteten Teilgebieten bei der Advektion der Hilfsfunktion nicht gegeben und nur mit erhöhtem numerischen Aufwand zu erreichen. Darüber hinaus führt der Advektionsschritt zur Degeneration der Abstandsfunktion, wodurch die für numerische Berechnungen positive Abstandseigenschaft von ϕ teilweise verloren geht und Fehler bei der Ermittlung geometrischer Grenzflächeneigenschaften zunehmen. Die Wiederherstellung der Abstandseigenschaft ist algorithmisch aufwändig und kann mit zusätzlichen Fehlern in der Massenerhaltung einhergehen. Zudem sind grenzflächenunstetige Materialkenngrößen auch bei der Level-Set-Methode über einen bestimmten Bereich beidseitig der Grenzfläche zu glätten. Das diskrete Einbringen von Übergangsbedingungen und singulären Quelltermen auf Kopplungsrandern ist wie bei allen impliziten Verfahren mit erheblichem algorithmischen und numerischen Mehraufwand verbunden.

Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Teilgebiete sind ausgeprägten Struktur- und Gestaltänderungen unterworfen, wobei Übergangsbedingungen auf Teilgebietskopplungsrandern

diskret eingebracht werden sollen und von Geometrieeigenschaften der Grenzfläche beeinflusst sind. Nach Bewertung existierender Verfahren hinsichtlich der genannten Kriterien überwiegen die Vorteile der Level-Set-Methode, die im Rahmen dieser Arbeit zur Erfassung von Grenzflächenbewegungen gewählt ist.

3.2 Level-Set-Methode

Aufgrund der in Abschnitt 3.1.2 genannten positiven Eigenschaften der Level-Set-Methode findet das Verfahren breite Anwendung im Rahmen von Aufgabenstellungen, bei denen die zu beschreibenden physikalischen Prozesse nachhaltig von geometrischen Grenzflächeneigenschaften beeinflusst sind. Dazu zählen u. a. Mehrfluidströmungen kompressibler Fluide [107] sowie inkompressibler Fluide mit signifikanten Oberflächenspannungsphänomenen [152], Kristallisationserscheinungen während Erstarrungsvorgängen [27, 53] oder die Entwicklung von Flammenfronten während Verbrennungsprozessen [110]. Darüber hinaus wird die Level-Set-Methode im Rahmen erweiterter Finite-Element-Methoden vor allem zur Simulation diskreter Risse und von Risswachstum [146, 149], aber auch zur Modellierung von Mehrfluidströmungen [29, 85], von dünnen Strukturen in Interaktion mit umgebenden Fluiden [168] und von Materialien mit Fehlstellen bzw. Materialeinschlüssen [148, 167] oder mit Versetzungen [15] angewendet.

3.2.1 Eigenschaften

Als Alternative zur Advektion C_0 -unstetiger Fraktionsfunktionen im Rahmen der Bewegungsbeschreibung von Fluidteilgebieten bei Zweifluidströmungen ist die Idee der Beschreibung von Grenzflächen als Isokontur einer im Grenzflächenbereich kontinuierlichen Funktion bereits in den Arbeiten von Dervieux & Thomasset [33, 34] formuliert. Unabhängig davon folgten systematische Studien im Rahmen von Hamilton-Jacobi-Formulierungen von Osher & Sethian [116], die auch den Namen Level-Set-Methode prägten. Im Gegensatz zur impliziten Bewegungsbeschreibung von Teilgebieten bei VOF-Methoden ist bei Level-Set-Methoden die Bewegung von Grenzflächen implizit erfasst. Dafür wird die Menge der Punkte einer gegebenen Grenzfläche Σ_t zwischen den offenen Teilgebieten Ω_t^1 und Ω_t^2 mit der Nullisokontur einer im Berechnungsgebiet Ω_t definierten, skalarwertigen und im Bereich der Grenzfläche C_0/C_1 -stetigen Funktion $\phi(\mathbf{x}, t)$ beschrieben,

$$\Sigma_t = \{\mathbf{x} \in \Omega_t \mid \phi(\mathbf{x}, t) = 0\} \quad . \quad (3.3)$$

Damit ergeben sich Vorteile bei der Ortsbestimmung der Grenzflächenlage und der Ermittlung der aus der Level-Set-Funktion ableitbaren relevanten geometrischen Grenzflächengrößen. Als einführendes Beispiel ist in Bild 3.7 das zweidimensionale Beobachtungsgebiet $\Omega_t = (-2, 2) \times (-2, 2)$ mit den durch die Kreisfunktion $x^2 + y^2 = 1$ voneinander getrennten Teilgebieten Ω_t^1 und Ω_t^2 dargestellt. Die Definition der skalaren Level-Set-Funktion $\phi(\mathbf{x}, t) = x^2 + y^2 - 1$ ermöglicht die Gebietszuordnung jedes räumlichen Punktes $\mathbf{x} \in \Omega_t$ über das Vorzeichen,

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}, t) &> 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_t^1 & , \\ \phi(\mathbf{x}, t) &< 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_t^2 & , \end{aligned} \quad (3.4)$$

und die Ortsbestimmung der Grenzflächenlage als Nullisokontur der Level-Set-Funktion,

$$\phi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad . \quad (3.5)$$

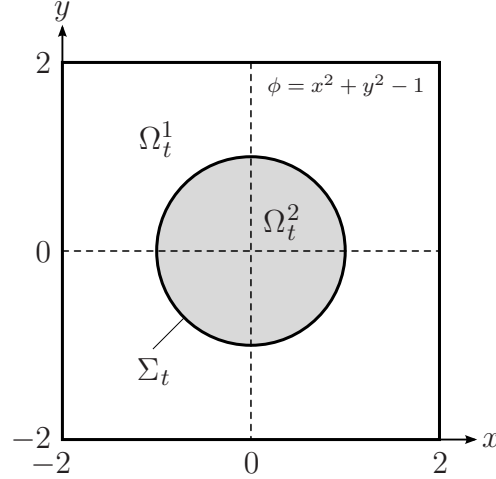


Bild 3.7: Kreisfunktion $\phi = x^2 + y^2 - 1$ als Nullisokontur in zwei Raumdimensionen.

Geometrie. Entlang der Grenzfläche ist der Wert der Level-Set-Funktion konstant. Damit ist auch die Änderung des Level-Set-Wertes in tangentialer Grenzflächenrichtung Null und das Vektorfeld $\nabla \phi(\mathbf{x}, t)$ orthogonal zu den Tangentenvektoren an die Grenzfläche bzw. normal zur Grenzfläche. Mit der L_2 -Norm $\|\nabla \phi(\mathbf{x}, t)\|$ des Gradientenvektors folgt die Definition der Einheitsnormalenvektoren $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)$ zur Grenzfläche direkt aus der Level-Set-Funktion,

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = \frac{\nabla \phi(\mathbf{x}, t)}{\|\nabla \phi(\mathbf{x}, t)\|} \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad . \quad (3.6)$$

Dabei ist das Einheitsnormalenvektorfeld in den Bereich $\phi(\mathbf{x}, t) > 0$ orientiert. Die Differenzierbarkeit der Level-Set-Funktion setzt C_0/C_1 -Stetigkeit im Bereich von Grenzflächen voraus. Eine entsprechend geeignete Definition der skalarwertigen Funktion $\phi(\mathbf{x}, t)$ ist daher zweckmäßig. Bei Aufgabenstellungen mit dominierenden Oberflächenspannungen ist ebenfalls der Kapillardruck zu errechnen, der mit Gleichung (2.43) proportional zur mittleren Oberflächenkrümmung κ ist. Diese ist als Divergenz des Einheitsnormalenvektorfeldes entlang der Grenzfläche definiert und folgt somit auch direkt aus der Level-Set-Funktion,

$$\kappa(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi(\mathbf{x}, t)}{\|\nabla \phi(\mathbf{x}, t)\|} \right) \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad . \quad (3.7)$$

Gleichung (3.7) erlaubt die Unterscheidung konvexer ($\kappa > 0$) sowie konkaver ($\kappa < 0$) Grenzflächenregionen, wenn das Vorzeichen des Normalenvektorfeldes (3.6) entsprechend den äußeren Normalenvektoren eines dafür festgelegten Teilgebietes gewählt ist. Zur Ermittlung integraler geometrischer oder physikalischer Größen sind die Definitionen der Signumfunktion

$$\text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t)) = \begin{cases} -1 & \text{für } \phi(\mathbf{x}, t) \leq 0 \\ +1 & \text{für } \phi(\mathbf{x}, t) > 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

und der Dirac-Deltafunktion

$$\delta(\phi(\mathbf{x}, t)) = \begin{cases} 0 & \text{für } \phi(\mathbf{x}, t) \neq 0 \\ 1 & \text{für } \phi(\mathbf{x}, t) = 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

zweckmäßig. Mit den Gebietszugehörigkeitsdefinitionen (3.4) und der Signumfunktion (3.8) sind Integrale einer Funktion $f(\mathbf{x}, t)$ über Teilgebiete als Integral über das gesamte räumliche Beobachtungsgebiet beschreibbar,

$$\int_{\Omega_t^1} f(\mathbf{x}, t) d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\Omega_t} f(\mathbf{x}, t) (1 + \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t))) d\Omega \quad (3.10)$$

$$\int_{\Omega_t^2} f(\mathbf{x}, t) d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\Omega_t} f(\mathbf{x}, t) (1 - \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t))) d\Omega \quad (3.11)$$

Gleiches gilt für Integrale über Grenzflächen,

$$\int_{\Sigma_t} f(\mathbf{x}, t) d\Sigma = \int_{\Omega_t} f(\mathbf{x}, t) \delta(\phi(\mathbf{x}, t)) d\Omega \quad (3.12)$$

bei Verwendung der Dirac-Deltafunktion (3.9).

Abstandsfunktionen. Im Rahmen der oben genannten Stetigkeitsanforderungen an die Level-Set-Funktion ist es zweckmäßig, diese als vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion zur Grenzfläche einzuführen. Der Gradient der Level-Set-Funktion besitzt dann fast überall im Berechnungsgebiet die für numerische Berechnungen positive Eigenschaft $\|\nabla \phi(\mathbf{x}, t)\| = 1$. Mit dem Abstand $\text{dist}(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}) = \|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|$ zweier Punkte \mathbf{x} und $\bar{\mathbf{x}}$ folgt die Definition

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \pm \min \text{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\Sigma) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_t, \quad \forall \mathbf{x}_\Sigma \in \Sigma_t \quad (3.13)$$

der vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion, deren Betrag den kürzesten euklidischen Abstand eines beliebigen Gebietpunktes \mathbf{x} zu den Grenzflächenpunkten \mathbf{x}_Σ angibt. Die Wahl des Vorzeichens in Gleichung (3.13) ist für die betrachteten Teilgebiete beliebig, aber fest. Aufgrund der Abstandsdefinition können bestimmte Punkte im Beobachtungsgebiet auftreten, an denen Äquidistanz zu mehreren Punkten der Grenzfläche vorliegt und der Gradient der Abstandsfunktion unbestimmt ist. Diese Einschränkung ist jedoch vernachlässigbar, da sich diese Punkte im Allgemeinen in entsprechender Entfernung von der Grenzfläche befinden, wo eine Gradientenbestimmung zur Ermittlung von Geometrieinformationen nicht notwendig ist.

Bild 3.8 zeigt beispielhaft die als Nullisokontur zum Zeitpunkt t in die vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion $\phi(\mathbf{x}, t) = \|\mathbf{x}\| - 1$ eingebettete und in Bild 3.7 skizzierte Kreisfunktion. Die Unstetigkeitsstelle befindet sich im Ursprung $\mathbf{x} = (x; y) = (0; 0)$ des Beobachtungsgebietes, wo die Abstandsfunktion den Wert -1 annimmt und Äquidistanz zu allen Punkten der Grenzfläche vorliegt. Die Stetigkeitsanforderungen zur Gradientenbestimmung der Abstandsfunktion sind jedoch an allen anderen Punkten des Beobachtungsgebietes erfüllt. Damit ist auch die Ermittlung geometrischer Grenzflächengrößen im Bereich der Nullisokontur der Abstandsfunktion

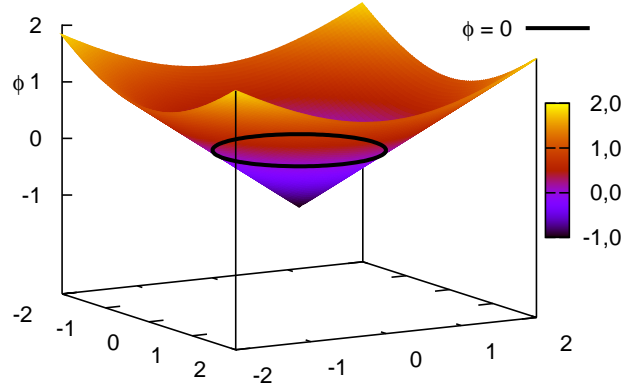


Bild 3.8: Kreisfunktion, Nullisokontur der zugehörigen vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion.

mit den Definitionen (3.6) und (3.7) möglich. Verschiedene Teilgebiete werden auch weiterhin über das Vorzeichen von $\phi(\mathbf{x}, t)$ identifiziert.

Bewegungsbeschreibung. Die Bahnlinie eines Punktes $\mathbf{x}_\Sigma(t)$ auf der Grenzfläche Σ_t stellt den geometrischen Ort aller Raumpunkte dar, den der Grenzflächenpunkt während seiner Bewegung nacheinander durchläuft. Diese Bewegung ist von der zeitveränderlichen Grenzflächengeschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{x}_\Sigma(t), t) = \mathbf{v}_\Sigma(t)$ bestimmt und mit Gleichung (3.1) beschrieben. Da die gebietsweit definierte Level-Set-Funktion $\phi(\mathbf{x}, t)$ per Definition an jedem Punkt der Grenzfläche zu jedem Zeitpunkt den Wert Null annimmt, folgt

$$\phi(\mathbf{x}_\Sigma(t), t) = \phi_\Sigma(t) = 0 \quad . \quad (3.14)$$

Die materielle Zeitableitung von Gleichung (3.14) führt nach Anwendung der Kettenregel auf

$$\frac{D\phi_\Sigma}{Dt} = \frac{\partial\phi_\Sigma}{\partial t} + \dot{\mathbf{x}}_\Sigma \cdot \nabla\phi_\Sigma = 0 \quad (3.15)$$

und unter Beachtung von Beziehung (3.1) auf die Evolutionsgleichung

$$\frac{\partial\phi_\Sigma}{\partial t} + \mathbf{v}_\Sigma \cdot \nabla\phi_\Sigma = 0 \quad , \quad (3.16)$$

die jedoch lediglich Gültigkeit für die Punkte der Grenzfläche besitzt. Für beliebige Gebietspunkte $\mathbf{x}_c(t)$ mit jeweiligem Isokonturwert c folgt die Verallgemeinerung der Beziehung (3.16), wenn zeitliche Konstanz der Isokonturwerte gefordert wird. Die materielle Zeitableitung von $\phi(\mathbf{x}(t), t) = \phi(\mathbf{x}_c(t), t) = c$ führt dann auf die gebietsweit definierte Evolutionsgleichung

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\phi = 0 \quad , \quad (3.17)$$

die für alle Isokonturlinien c von $\phi(\mathbf{x}, t)$ gilt und für den Spezialfall $c = 0$ in (3.16) übergeht. Gleichung (3.17) wird in der Literatur als Level-Set-Gleichung bezeichnet und beschreibt implizit und in Euler'scher Betrachtungsweise die Bewegung von Grenzflächen in einem gegebenen Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$. Aufgabenstellungen, bei denen das Geschwindigkeitsfeld ausschließlich auf der Grenzfläche vorliegt, können mit (3.17) nicht erfasst werden und erfordern

geeignete Extrapolationsmethoden [3, 27] zur Erzeugung eines gebietsweiten Geschwindigkeitsfeldes. Im Rahmen von Aufgabenstellungen mit oberflächengekoppelten Teilkontinua sind die Geschwindigkeiten jedoch mit der Lösung der gebietsweit formulierten Modellgleichungen in natürlicher Weise im gesamten Berechnungsgebiet vorgegeben. Die Bestimmtheit der mit (3.17) berechneten Level-Set-Funktion $\phi(\mathbf{x}, t)$ zu einem Zeitpunkt $t > t_a$ erfordert lediglich die Festlegung einer initialen vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion

$$\phi(\mathbf{x}, t_a) = \phi_a(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_a \quad (3.18)$$

bezüglich der Lage der anfänglichen Grenzfläche Σ_a zum Zeitpunkt t_a . Grundsätzlich ist die Vorgabe von Randbedingungen nicht notwendig und auch nicht sinnvoll, da die raumzeitliche Grenzflächenlage sowie deren Randabstand zu einem Zeitpunkt $t > t_a$ im Allgemeinen nicht bekannt sind und Randwerte im Rahmen von Reinitialisierungsverfahren (Abschnitt 3.3) entsprechend verändert und angepasst werden. Die Vorgabe des Level-Set-Gradienten auf Rändern mit Informationseintrag hingegen kann bei bestimmten Aufgabenstellungen sinnvoll sein, zumal die zeitliche Änderung der Level-Set-Funktion durch den Gradienten und das Geschwindigkeitsfeld bestimmt ist. Das Einbringen von Randgradientenwerten der Level-Set-Funktion führt jedoch auf integrale Randformulierungen, deren numerische Umsetzung noch wenig erforscht ist. Anstelle der Vorgabe von Level-Set-Gradienten auf Gebietsrändern ergibt sich bei Auswertung der Grenzflächennormalenvektoren in den Übergangsbedingungen auch die Möglichkeit der direkten Vorgabe dieser Normalenvektoren auf Rändern mit Informationseintrag.

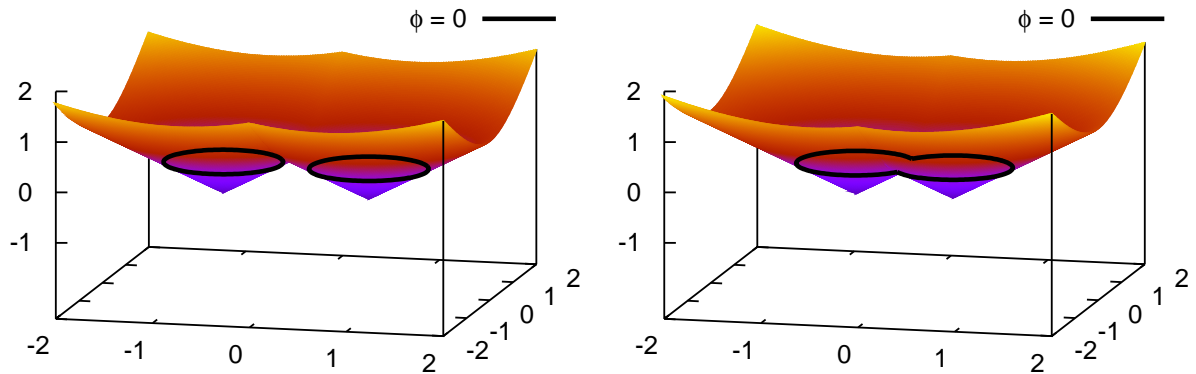


Bild 3.9: Topologieänderung von Gebieten und Grenzflächen mit der Level-Set-Methode.

Die Lösung von Gleichung (3.17) erfasst die Bewegung der Level-Set-Funktion $\phi(\mathbf{x}, t)$ in einem Geschwindigkeitsfeld und damit implizit die Lageänderung von Grenzflächen. Darüber hinaus werden auch Form- und Gestaltänderungen von Teilgebieten und Grenzflächen auf natürliche Weise erfasst. Bild 3.9 verdeutlicht diese Eigenschaft des Verfahrens und zeigt die Gebietsvereinigung von Gebieten gleichen Vorzeichens beim Zusammentreffen von Grenzflächen sowie die entsprechenden vorzeichenbehafteten Abstandsfunktionen.

3.2.2 Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung

Die stabilisierte und zeitdiskontinuierliche Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung der Level-Set-Gleichung für die Raum-Zeit-Scheibe $Q_n = \Omega_t \times I_n$ hat die Form

$$\int_{Q_n} \delta \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \right) dQ \quad (3.19a)$$

$$+ \int_{\Omega_n} \delta \phi(t_n^+) \llbracket \phi \rrbracket_n d\Omega \quad (3.19b)$$

$$+ \sum_e \int_{Q_{n,e}} \mathcal{L}(\delta \phi) \tau_L \mathcal{L}(\phi) dQ = 0 \quad \forall \delta \phi \quad (3.19c)$$

Darin ist

$$\mathcal{L}(\phi) = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \quad (3.20)$$

das Residuum der differentiellen Form (3.17). Die numerische Lösung der Level-Set-Modellgleichung im Raum-Zeit-Gebiet Q erfolgt durch sequentielle Auswertung von (3.19) für alle Raum-Zeit-Scheiben Q_0, \dots, Q_{N-1} und beginnt nach (3.18) mit der vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion ϕ_a bezüglich der Lage der anfänglichen Grenzfläche,

$$\phi(t_0^-) = \phi_a \quad \text{in} \quad \Omega_a \quad (3.21)$$

Beschreibungsvariable der Formulierung ist der Level-Set-Wert ϕ , der innerhalb einer Raum-Zeit-Scheibe C_0 -stetig und an den Übergängen benachbarter Zeitscheiben C_0 -unstetig approximiert ist. Die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzten isoparametrischen 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelemente interpolieren Geometrie und Level-Set-Werte mit linearen Polynomansätzen.

Die gewichtete Integralformulierung (3.19) zur Lösung der Level-Set-Gleichung zeigt in Zeile (3.19a) die schwache Form der Evolutionsgleichung (3.17) nach Bubnov-Galerkin-Wichtung und Integration über das Berechnungsgebiet. Das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} wird dabei als bekannt vorausgesetzt. Der Sprungterm des zeitdiskontinuierlichen Galerkin-Verfahrens in Zeile (3.19b) ist mit der Stetigkeitsbedingung (2.46) definiert und erfüllt die Kontinuität der Level-Set-Funktion an Zeitscheibengrenzen in schwacher Form. In Zeile (3.19c) folgt die im Rahmen dieser Arbeit gewählte Galerkin/Least-Squares-Stabilisierung zur Berücksichtigung ausgezeichneter Richtungen der Informationsausbreitung bei dominierendem konvektiven Term. Der Stabilisierungsparameter τ_L ist elementweise definiert und nachfolgend näher erläutert.

Stabilisierung. Die Anwendung des Bubnov-Galerkin-Verfahrens bei der numerischen Lösung von Aufgabenstellungen mit dominierender Konvektion führt zu unphysikalischen Oszillationen der Lösung in Raum und Zeit, da der richtungsabhängige Informationsfluss vom Verfahren nicht berücksichtigt ist. Die Evolutionsgleichung der Level-Set-Methode ist eine reine Konvektionsgleichung, deren richtungsabhängige Informationsausbreitung bei der numerischen Berechnung mit (3.19) durch den Stabilisierungsterm in Zeile (3.19c) Berücksichtigung findet. Damit sind auch in Bereichen ausgeprägter Konvektion glatte Lösungen möglich. Die Güte der

Lösung ist jedoch maßgeblich von der Wahl des den Stabilisierungsterm wichtenden Parameters τ_L bestimmt, der wie schon von Kölke in [85], im Rahmen dieser Arbeit zu

$$\tau_L = \left(\left(\frac{2}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{2 \|\mathbf{v}_{\text{rel}}\|}{h} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.22)$$

gewählt ist. Die beiden Terme in (3.22) zeigen die Abhängigkeit des Stabilisierungsparameters vom dominierenden Differentialoperator. Im Grenzfall der Konvektionsdominanz übt die lokale Elementlänge h größeren Einfluss auf τ_L aus, während bei ausgeprägt instationären Strömungen die Zeitscheibendicke Δt die Größe des Stabilisierungsparameters dominiert. Als lokales Längenmaß h ist der Durchmesser eines Kreises gewählt, dessen Flächeninhalt der doppelten zeitgemittelten Elementfläche entspricht. Die L_2 -Norm des mittleren Geschwindigkeitsvektors \mathbf{v}_{rel} bezüglich der Netzgeschwindigkeit ist als Maß für die konvektive Geschwindigkeit im Element definiert. Mit verschwindenden Elementabmessungen bei feiner werdender Diskretisierung strebt auch der Stabilisierungsparameter gegen Null.

3.2.3 Geometrieinformationen

Grenzflächenlage im Element. Die Level-Set-Methodik ermöglicht Berechnungen von Grenzflächenbewegungen auf ortsfesten Diskretisierungen. Damit schneiden Grenzflächen dann ausgezeichnete Elemente des Berechnungsnetzes, in denen die den Teilgebieten zugeordneten verschiedenen Materialien gleichzeitig vorliegen. Für die präzise Auswertung von Elementintegralen ist es daher sinnvoll, separat über die mit der Grenzflächenlage im Element definierten Elementteilgebiete zu integrieren. Des Weiteren erfordern einige physikalische Aufgabenstellungen neben der Auswertung von Elementintegralen auch die Integration über die in den Elementen vorliegende Grenzfläche. Hier ist die Wahl finiter Raum-Zeit-Elemente vorteilhaft, denn diese bieten bei Verwendung linearer Polynomansätze zur Approximation von Level-Set-Werten die Möglichkeit, die diskrete Grenzflächenlage in grenzflächenbeherbergenden Elementen mit hoher Genauigkeit zu ermitteln.

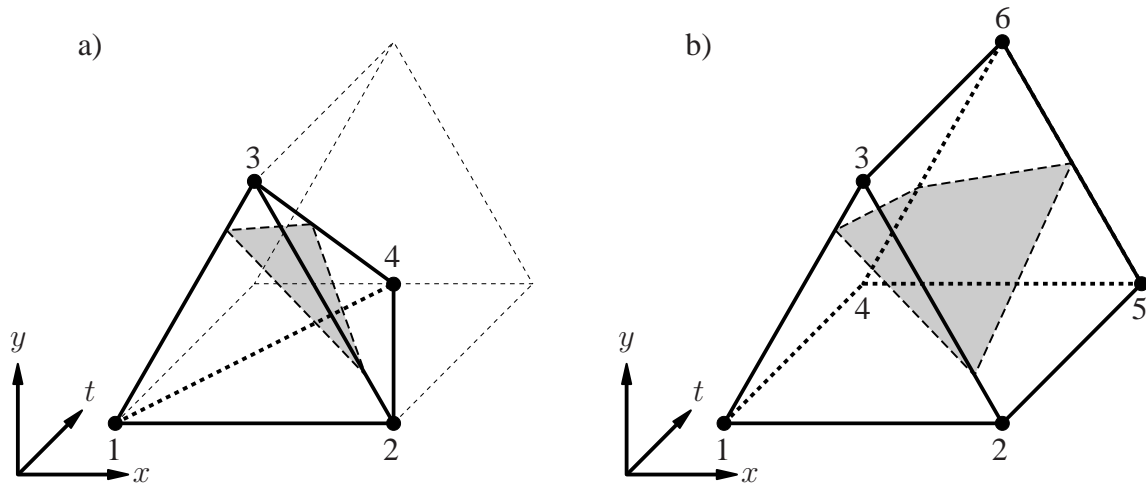


Bild 3.10: Grenzflächenlage im Raum-Zeit-Element: a) Simplexelemente, b) Prismenelemente.

Exakt gelingt dies auf den Elementrändern mit Interpolation der Nullstellen von $\phi(\mathbf{x}, t)$. Bei der Wahl von Raum-Zeit-Simplexelementen ist mit den Randnullstellen auch die präzise Lage der Grenzfläche im Elementgebiet bekannt, bei Raum-Zeit-Prismenelementen gilt dies jedoch nur für die Raumdimensionen, siehe Bild 3.10. Die Verwendung von Elementen mit Polynomansätzen höherer Ordnung verbessert zwar die Genauigkeit bei der Approximation der Level-Set-Funktion und ermöglicht die Abbildung von Grenzflächen auch unterhalb der Längenskalen der zugrunde liegenden Ortsdiskretisierung, erschwert jedoch auch die exakte Lageermittlung der Grenzfläche im Elementgebiet sowie die Integration über Elementteilgebiete und Grenzflächen.

Normale und Krümmung. Im Rahmen von Aufgabenstellungen mit oberflächengekoppelten Teilkontinua treten Interaktionsterme auf, die Wechselwirkungen von Teilkontinua beschreiben und neben zu koppelnden physikalischen Teilgebietsgrößen auch Geometrieinformationen des Kopplungsrandes beinhalten. Entsprechend sind neben der Grenzflächenlage auch Grenzflächennormale und bei ausgeprägten Oberflächenspannungen zusätzlich Grenzflächenkrümmungen zu ermitteln. Mit (3.6) ist die Normale des Kopplungsrandes an einem Grenzflächenpunkt aus den ersten räumlichen Ableitungen der dort bestimmten Lösung der Level-Set-Gleichung zu ermitteln. Die Berechnung von Grenzflächenkrümmungen benötigt mit Gleichung (3.7) die zweimalige räumliche Differentiation. Obwohl dieser Ansatz im Rahmen von Finite-Element-Methoden grundsätzlich möglich ist, erfordert die zweimalige Differentiation mindestens Ansatzpolynome zweiten Grades, die aufgrund der gewählten linearen Ansätze zur Approximation der Level-Set-Gleichung nicht zur Verfügung stehen. Darüber hinaus sind Ableitungen von Polynomen mit Verlust an Genauigkeit verbunden, wodurch lediglich elementweise räumlich konstante Grenzflächennormalvektoren aus der Level-Set-Lösung folgen.

Beschränkungen der direkten Ermittlung von Geometrieinformationen aus Level-Set-Lösungen können z. B. mit Verwendung von Gradientenmittelungs- oder -wiederherstellungsverfahren umgangen werden. Dazu zählen globale L^2 -Projektionen, die von Chessa & Belytschko [28], Kölke [85] oder Smolianski [142] zur Berechnung von Geometrieinformationen eingesetzt werden. Di & Li [35] hingegen verwenden lokale L^2 -Projektionen, die auf separat auszuwertende Integralgleichungen für jeden Knoten der Diskretisierung führen. Weitere Verfahren, bei denen die Berechnung des Lösungsgradienten lediglich knotenweise und mit Lösungsinformationen aus der lokalen Knotenumgebung erfolgt, sind u. a. das Patch-Recovery Verfahren nach Zienkiewicz & Zhu [166], die polynomerhaltende (polynomial-preserving) Recovery Technik nach Zhang [164] oder die superkonvergente Cluster-Recovery Methode nach Huang & Yi [70], siehe auch Abschnitt 3.4.1. Grundlegend für diese Wiederherstellungsverfahren ist die Verwendung einer diskreten Methode der kleinsten Quadrate (discret least-squares) zur Mittelung lokaler Lösungsinformationen. Marchandise et al. [97] verwenden im Rahmen diskontinuierlicher Galerkin-Methoden ähnliche Techniken zur Geometriermittlung von Grenzflächen. Vertiefend sind verschiedene der genannten Verfahren in Abschnitt 3.4 vergleichend untersucht. Im Rahmen schwacher Formulierungen ist auch die Verwendung von Laplace-Beltrami-Operatoren auf Grenzflächen sinnvoll, siehe z. B. [51, 58, 76] und Abschnitt 5.2.3. Zweite Ableitungen des Operators verschwinden nach partieller Integration und somit verbleiben lediglich erste Ableitungen von Ansatz- und Wichtungsfunktionen. Entsprechend sind auch direkte Krümmungsberechnungen nicht notwendig. Problematisch ist jedoch die Behandlung der aus partieller Integration hervorgegangenen Randterme, wenn Grenzflächen Gebietsränder schneiden, auf denen Geometrieinformationen der Grenzfläche nicht vorliegen.

3.2.4 Erhaltungseigenschaften

Bei Volume-of-Fluid-Methoden besteht ein linearer Zusammenhang zwischen der mit (3.2) im Beobachtungsgebiet transportierten Fraktionsfunktion ψ und der Fluidichte $\rho(\mathbf{x}, t)$ eines betrachteten Materialpunktes. Damit ist die Massenerhaltung bei Verwendung konservativer Verfahren zur Lösung von (3.2) der Volume-of-Fluid-Methode inhärent. Bei Level-Set-Methoden hingegen besteht lediglich ein linearer Zusammenhang zwischen der Fluidichte und dem Vorzeichen (3.8) der Level-Set-Funktion. Entsprechend ist die Massen- bzw. Volumenerhaltung auch bei Verwendung konservativer Verfahren zur Lösung von Gl. (3.17) nur näherungsweise erfüllt. Die Güte der erzielten Lösung ist z. B. vom gewählten Diskretisierungsverfahren, von der verwendeten Ansatzordnung für ϕ , von der Feinheit der Ortsdiskretisierung im Grenzflächenbereich, von der Zeitschrittweite und vom gewählten Reinitialisierungsverfahren abhängig.

Die Verwendung von Ansätzen höherer Ordnung führt zu wesentlich geringeren Abweichungen in der Volumenerhaltung, es bestehen jedoch die in Abschnitt 3.2.2 genannten Schwierigkeiten bei der exakten Lageermittlung der Grenzfläche. Im Rahmen von FE-Methoden bietet es sich ebenfalls an, die Elementdichte im Bereich von Grenzflächen zu erhöhen. Dafür ist z. B. der Einsatz h-adaptiver Verfahren [93] zweckmäßig, wobei jedoch das Vermeiden entarteter Elemente und entsprechende Algorithmen zur Neuvernetzung numerisch aufwändig sind, insbesondere bei räumlich dreidimensionalen Aufgabenstellungen. Eine Alternative dazu ist der Einsatz r-adaptiver Verfahren [92, 153], bei denen lediglich die Knoten des vorhandenen Berechnungsnetzes entsprechend einer definierten Zielfunktion verschoben werden. Im Rahmen komplexer Aufgabenstellungen ist es jedoch schwierig, alle zu berücksichtigenden Aspekte bezüglich örtlicher Netzverfeinerungen in einer Zielfunktion zu vereinigen. Scheidet der Einsatz adaptiver Verfahren aus, ist auch ein nachgeschalteter Berechnungsschritt zur Wiederherstellung des initialen Volumens möglich. Smolianski [142] z. B. verwendet zur Erhaltung ursprünglicher Teilgebietsvolumina einen gebietskonstant definierten Volumenkorrekturwert ϕ_c , der nach jedem Zeitschritt zur ermittelten Level-Set-Lösung hinzugefügt wird. Die Größe des Wertes folgt aus der auf die Grenzflächenlänge bezogenen Volumenabweichung bezüglich eines zu Beginn der Berechnung ermittelten Referenzvolumenwertes. Dieser Ansatz ist jedoch nicht optimal, da der Volumenfehler im Allgemeinen nicht gleichmäßig über die transportierte Grenzfläche verteilt ist. Zudem ist die Volumenabweichung bei deutlich inhomogener Teilgebietsverteilung im Beobachtungsgebiet ausgeprägt ortsabhängig und von nur einem gebietsweit definierten Korrekturwert unzureichend erfasst. Ein verbesserter Ansatz wird von Mut et al. [108] im Rahmen eines Reinitialisierungsverfahrens vorgeschlagen. Der Korrekturwert ist dabei mit einer anhand lokaler Volumenfehler ermittelten, gebietsvariablen Funktion gewichtet, die so die Ortsabhängigkeit von Volumenabweichungen zweckmäßig einbringt.

Alternative Ansätze in Form von hybriden Schemata verringern den Volumenfehler durch Kombination der Level-Set-Methodik mit volumenerhaltenden Verfahren. So stellen z. B. Enright et al. [44] die Partikel-Level-Set-Methode vor, bei der masselose Markerpartikel beidseitig der Grenzfläche platziert sind und in Lagrange'scher Betrachtung mit dem externen Geschwindigkeitsfeld durchs Gebiet transportiert werden. Die mit geringen Fehlern behafteten neuen Partikelpositionen am Ende eines Zeitschrittes dienen dann der Rekonstruktion der Nullniveaufläche der in Euler'scher Betrachtung transportierten Level-Set-Funktion. Die Anwendung der Partikel-Level-Set-Methode kann die Lösungsgenauigkeit der Level-Set-Methode wesentlich

steigern, wobei die Güte der Lösung jedoch durch die Anzahl der advektierten Partikel beschränkt ist. Sussman und Puckett [151] kombinieren Volume-of-Fluid- und Level-Set-Methode in einem Verfahren, bei dem die Skalarfunktionen beider Techniken nach separatem Transport durch das Berechnungsgebiet zur VOF-basierten Rekonstruktion der Grenzflächenlage miteinander gekoppelt sind. Damit trägt die Verknüpfung beider Methoden bei diesem Ansatz zur Verbesserung der Volumenerhaltung bei. Der Volumenfehler liegt im Bereich üblicher VOF-Verfahren. Die zusätzlich notwendige Advektion einer unstetigen Fraktionsfunktion ist neben dem erhöhten numerischen Aufwand jedoch als nachteilig zu bewerten. Ein alternativer Ansatz zur Kopplung beider Verfahren ist von van der Pijl et al. [159] vorgestellt, die im Rahmen finiter Differenzen die Fraktionswerte der VOF-Funktion in einer grenzflächenbeherbergenden Zelle anhand der Level-Set-Lösung zu Beginn eines Zeitschrittes und mit Hilfe der ausgewerteten Zellenrandflüsse auch am Ende eines Zeitschrittes berechnen. Die Differenz aus flussbasiertem und dem mit der Level-Set-Funktion ermittelten Fraktionswert am Zeitschrittende dient dann der lokalen Korrektur der Level-Set-Werte. Auch bei diesem Ansatz ist die Güte der Volumenerhaltung im Bereich üblicher VOF-Verfahren, wobei der Transport einer Fraktionsfunktion vermieden wird. Zur Volumenerhaltung ist auch die Verwendung alternativer Level-Set-Funktionen denkbar, wie z. B. von Olsson & Kreiss [115] im Rahmen der konservativen Level-Set-Methode. Dabei wird anstatt der Abstandsfunktion eine regularisierte Heaviside-Funktion mit einem konservativen Verfahren durchs Gebiet transportiert. Zusätzliche Quellterme erhalten die Breite der Regularisierungszone, um so implizit Volumenerhaltung sicherzustellen.

3.3 Reinitialisierung

Die Notwendigkeit der Reinitialisierung bei ausgeprägten Gradienten einer zur Beschreibung bewegter Grenzflächen verwendeten kontinuierlichen Skalarfunktion bei Zweifluidströmungen ist bereits in den Arbeiten von Dervieux & Thomasset [34] sowie Thompson [156] erwähnt. Jedoch erst mit Entwicklung der Level-Set-Methodik rückten entsprechende leistungsfähige Reinitialisierungsalgorithmen in den Fokus der Forschung [31, 152]. Die Aufgabe dieser Algorithmen ist es, die ursprüngliche Abstandseigenschaft der Level-Set-Funktion im Bereich der Grenzfläche möglichst exakt und abseits davon zumindest näherungsweise und mit vertretbarem numerischen Aufwand wiederherzustellen. Dabei sollte die räumliche Position der Grenzfläche erhalten bleiben, um die mit der Level-Set-Methode eingebrachten Ungenauigkeiten in der Massenerhaltung nicht unnötig zu erhöhen.

3.3.1 Einführung

Die Initialisierung der Level-Set-Funktion als vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion ϕ_a bezüglich der anfänglichen Grenzflächenlage Σ_a erfolgt u. a. aufgrund der für numerische Berechnungen positiven Eigenschaft $\|\nabla\phi_a\| = 1$. Infolge veränderlicher Richtungsableitungen des gebietsweiten Geschwindigkeitsfeldes entlang der charakteristischen Richtungen der Grenzflächennormalen verliert die mit (3.17) berechnete Level-Set-Funktion jedoch im Regelfall ihre ursprüngliche Abstandseigenschaft. Wie in Bild 3.11 beispielhaft dargestellt, treten lokal ausgeprägte Abflachungen bzw. Aufsteilungen der Level-Set-Funktion auf. Diese üben einerseits negativen Einfluss auf das Lösungsverhalten der mit (3.19) diskretisierten Level-Set-Gleichung

aus und führen andererseits zur reduzierten Genauigkeit bei der Ermittlung der Grenzflächenlage und daraus resultierend auch von Normalenvektor- und Krümmungsfeldern.

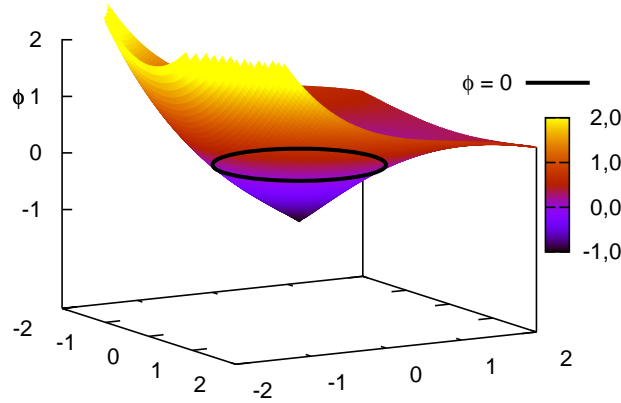


Bild 3.11: Kreisfunktion, Nullisokontur einer degenerierten Level-Set-Funktion.

Ein möglicher Ansatz, degenerierte Abstandsfunktionen zu vermeiden, besteht in den bereits in Abschnitt 3.2.1 erwähnten Extrapolationsmethoden [3, 27] zur Berechnung eines gebietsweiten Geschwindigkeitsfeldes, das die Level-Set-Funktion konform zu den lokalen Grenzflächengeschwindigkeiten bewegt. Der im Allgemeinen verwendete Ansatz besteht jedoch darin, die Level-Set-Funktion nach einer durch die Aufgabenstellung zu bestimmenden Anzahl berechneter Zeitintervalle als Abstandsfunktion zu „reinitialisieren“. Dabei wird die errechnete Level-Set-Funktion ϕ durch eine modifizierte Funktion $\check{\phi}$ ersetzt, die möglichst die Abstandseigenschaft $\|\nabla \check{\phi}\| = 1$ besitzt und deren Nullniveau $\check{\phi} = 0$ identisch dem der zu ersetzenden Funktion ϕ ist. Dieses Vorgehen ist zulässig, da lediglich die Nullisokontur der entarteten Abstandsfunktion zur Rekonstruktion der Grenzflächenlage notwendig ist, während alle anderen Konturflächen abseits der Grenzfläche ($\phi \neq 0$) nicht der Beschreibung der Grenzflächenbewegung dienen. Die Forderung nach Erhalt der Grenzflächenlage bei gleichzeitiger Reinitialisierung als vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion ist aufgrund der Diskretisierung bei numerischen Berechnungen jedoch im Allgemeinen nicht möglich.

Im Rahmen zeitdiskontinuierlicher Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierungen der Level-Set-Gleichung bietet es sich an, die Level-Set-Funktion zum gewählten Reinitialisierungszeitpunkt $t_r = t_n$ lediglich am Ende der Raum-Zeit-Scheibe Q_{n-1} wiederherzustellen. Die modifizierte Funktion $\check{\phi}$ geht dann mit der Stetigkeitsbedingung

$$\phi(t_n^+) - \check{\phi}(t_n^-) = 0 \quad \text{in } \Omega_n \quad (3.23)$$

in den Sprungterm (3.19b) der Variationsformulierung (3.19) ein und dient, ähnlich der Initialisierung in (3.21), als Ausgangslösung der aktuell zu berechnenden Zeitscheibe Q_n .

Reinitialisierungsverfahren. Ziel jedes Reinitialisierungsverfahrens ist es, ausgehend von der aktuellen Grenzflächenlage, die ursprüngliche Abstandseigenschaft der Level-Set-Funktion wiederherzustellen. Ein einfacher und robuster Ansatz dafür ist die direkte Methode (Brute-Force-Method) nach Chopp [31], bei der die implizit erfasste Grenzflächenlage parametrisiert und

durch geometrische Primitiva approximiert ist. Ausgehend davon erfolgt die Ermittlung des kürzesten Abstandes aller Knoten der Ortsdiskretisierung zu den diskret vorliegenden Grenzflächenprimitiva, wobei die Vorzeichen von neu ermittelter und degenerierter Funktion gleich sind. Das Auftreten teilweise signifikanter Volumen- und Lagefehler bei der direkten Methode motiviert zur Erweiterung des Verfahrens um einen Volumenkorrekturschritt [108]. Aufgrund des hohen numerischen Aufwandes ist der Einsatz der direkten Methode jedoch lediglich im Nahbereich der Grenzfläche sinnvoll. Parolini [118] ermittelt im Rahmen der lokalen Grenzflächenprojektion (Interface local projection) eine approximative Abstandsfunktion, indem die jeweils in grenzflächenbeherbergenden Dreieckselementen vorliegende kantenunstetige Abstandslösung in eine schwache Formulierung für den Nahbereich der Grenzfläche überführt wird. Damit ist die Parametrisierung der Grenzfläche bei diesem Verfahren vermieden. Zur Abstandsermittlung im Fernbereich ist jedoch ein alternatives Reinitialisierungsverfahren notwendig.

Der von Sussman et al. [152] vorgestellte PDE-Ansatz gründet auf einer instationären, nichtlinearen Advektionsgleichung, die mit der degenerierten Abstandsfunktion als Ausgangslösung in künstlicher Zeit τ gelöst wird und deren stationäre Lösung der Eikonalgleichung $\|\nabla\phi\| = 1$ entspricht. Die Differentialgleichung ist aufgrund unstetiger Terme jedoch zu regularisieren, wodurch Fehler in der Volumenerhaltung auftreten, die nur mit Formulierung entsprechender Nebenbedingungen [150] zu minimieren sind. Auch ist das Lösen nichtlinearer Differentialgleichungen mit einem nicht zu vernachlässigenden numerischen Aufwand verbunden. Alternativ zum PDE-Ansatz hat sich die Fast-Marching-Methode [135] zur Approximation der Eikonalgleichung durchgesetzt. Dabei wird mit bekannter Ausgangslösung an allen Knoten grenzflächenbeherbergender Elemente die reinitialisierte Abstandsfunktion sukzessive und mit zunehmendem Abstand von der Grenzfläche aufgebaut. Die Effizienz des Verfahrens gründet auf einer minimalen Bearbeitungshäufigkeit der Knoten des Berechnungsnetzes in Verbindung mit dynamischen Suchdatenstrukturen. Die Genauigkeit der Abstandsbestimmung ist mit der Ansatzordnung zur Lösung der Eikonalgleichung sowie mit der Güte der Startlösung festgelegt. Verschiedene Reinitialisierungsverfahren sind in nachfolgenden Abschnitten detailliert vorgestellt und in Abschnitt 3.3.7 vergleichend untersucht.

Definitionen. Betrachtet wird das räumliche Berechnungsgebiet Ω_r zum Reinitialisierungszeitpunkt t_r , das mit n^{el} finiten Elementen $e_i, i = \{1, \dots, n^{el}\}$ diskretisiert ist. Die geordnete Menge aller Elemente der Diskretisierung ist mit \mathcal{E} , die Menge aller Knoten mit \mathcal{N} und die Menge aller von der Grenzfläche Σ_r geschnittenen oder berührten Elemente mit \mathcal{E}^Σ bezeichnet. Der Nahbereich der Reinitialisierung ist als das Gebiet Ω_r^Σ der Elemente in $\mathcal{E}^\Sigma \subset \mathcal{E}$ definiert,

$$\Omega_r^\Sigma = \left\{ \mathbf{x} \in \Omega_r \mid \mathbf{x} \in e, e \in \mathcal{E}^\Sigma \right\} \quad , \quad \mathcal{E}^\Sigma = \left\{ e \in \mathcal{E} \mid e \cap \Sigma_r \neq \emptyset \right\} \quad , \quad (3.24)$$

das Gebiet eines Elementes im Nahbereich mit $\Omega_{r,e}^\Sigma$. Bei unterschiedlichen Reinitialisierungsverfahren für Nah- und Fernbereich wird die Level-Set-Funktion im Nahbereich lediglich an den Elementknoten der Knotenmenge $\mathcal{N}^\Sigma \subset \mathcal{N}$ der Elemente in \mathcal{E}^Σ reinitialisiert. Der Fernbereich umfasst das Gebiet der Menge aller Elemente $\mathcal{E}^{\text{fern}} = \mathcal{E} \setminus \mathcal{E}^\Sigma$, die nicht dem Nahbereich zugeordnet sind. Die Menge aller Knoten des Fernbereichs ist mit $\mathcal{N}^{\text{fern}} = \mathcal{N} \setminus \mathcal{N}^\Sigma$ definiert.

3.3.2 Direkte Methode

Die direkte Methode nach Chopp [31] beruht auf der in einem ersten Schritt ermittelten explizit gegebenen Lage der Grenzfläche. Diese ist bei finiten Elementen mit räumlich linearen Ansätzen durch geometrische Primitiva (Liniensegmente im 2D-Raum, Dreiecksegmente im 3D-Raum) approximiert, die von Interpolationspunkten des Nullniveaus der Level-Set-Funktion auf Elementrändern aufgespannt werden. In einem zweiten Schritt folgt die Ermittlung des geringsten Abstandes jedes Knotens der Diskretisierung zu den Grenzflächenprimitiva. Die Vorzeichen der ermittelten Abstandsfunktion $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t_r)$ und der zu ersetzenden Level-Set-Funktion $\phi(\mathbf{x}, t_r)$ sind identisch. Das Verfahren ist zwar sehr robust und einfach zu implementieren, der Zeitaufwand zur Rekonstruktion der Abstandseigenschaft wächst bei steigender Knotenanzahl jedoch mit höherer Ordnung an. Die Reinitialisierung der Abstandsfunktion lediglich in einem schmalen Band um die Grenzfläche (Narrow-Band-Approach [2]) oder die Verwendung von Quadtree-/Octree-Verfahren [147] tragen erheblich zur Reduktion des Zeitaufwandes bei. Im Randbereich und im Bereich stark gekrümmter Grenzflächen geht die Verwendung der direkten Methode mit ausgeprägten Verschiebungen des Nullniveaus und damit entsprechenden Fehlern in der Lage- und Volumenerhaltung einher, siehe Bild 3.12.

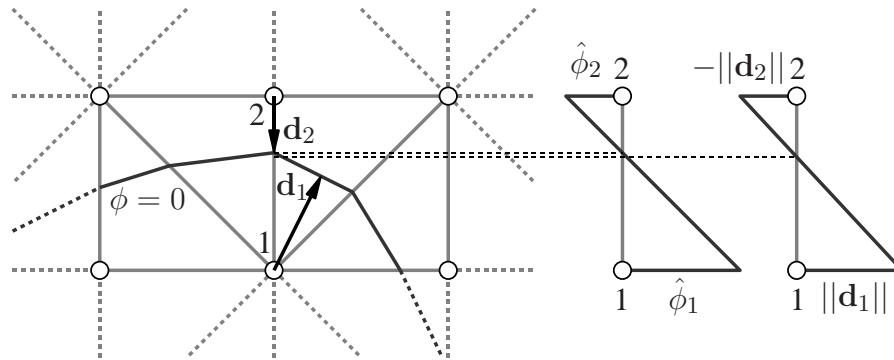


Bild 3.12: Verschiebung des Nullniveaus bei Anwendung der direkten Methode.

Modifikation. Zur Minderung dieser Fehler ist eine Modifikation des Verfahrens in diesen Bereichen sinnvoll. Dafür wird während der Ermittlung des geringsten Abstandes an den Knoten $k \in \mathcal{N}^\Sigma$ des Nahbereiches überprüft, ob der dichteste Punkt auf der Grenzfläche mit zwei Segmentkanten und damit einer Elementkante zusammenfällt (bei Gebietsrändern lediglich eine Segmentkante), wie für Knoten 2 in Bild 3.12 skizziert. Nach Ermittlung der jeweiligen Elementkante folgt die Überprüfung des eingeschlossenen Winkels der Grenzflächensegmente an der Elementkante. Bei Unterschreitung eines vorab festgelegten Winkels erfolgt die Modifikation der neu ermittelten Abstandswerte an den überprüften Knoten dahingehend, dass das Verhältnis der ursprünglichen Level-Set-Werte an der untersuchten Elementkante erhalten bleibt.

3.3.3 Direkte Methode mit Volumenkorrektur

Wie in Abschnitt 3.3.2 erläutert, geht die direkte Reinitialisierung im Bereich großer Krümmungen und des Gebietsrandes mit signifikanten Volumen- und Lagefehlern der neuen Abstands-

funktion einher. Mut et al. [108] schlagen deshalb ein Verfahren mit Korrektur des Volumenfehlers im Nahbereich vor. Dafür wird die Abstandsfunktion $\phi^*(\mathbf{x}, t_r)$ zu den Grenzflächensegmenten in einem ersten Schritt für alle Knoten $k \in \mathcal{N}^\Sigma$ des Nahbereiches mit der direkten Methode ermittelt, wobei zur Abstandsermittlung lediglich Segmente aus Elementen am betrachteten Knoten und an seinen Nachbarknoten herangezogen werden. Die Volumendifferenz aus degenerierter Abstandsfunktion $\phi(\mathbf{x}, t_r)$ und neuer Abstandsfunktion $\phi^*(\mathbf{x}, t_r)$ in einem Element $e \in \mathcal{E}^\Sigma$ des Nahbereiches folgt mit

$$\Delta V_e(\phi, \phi^*) = \frac{1}{2} \int_{\Omega_{r,e}^\Sigma} [\text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t_r)) - \text{sign}(\phi^*(\mathbf{x}, t_r))] d\Omega \quad (3.25)$$

und verschwindet nach Addition eines elementweise konstanten Korrekturwertes η_e^Σ ,

$$\Delta V_e(\phi, \phi^* + \eta_e^\Sigma) = 0 \quad . \quad (3.26)$$

Die Ermittlung des Korrekturwertes erfolgt iterativ mit Lösung der im Allgemeinen nichtlinearen Gleichung (3.26) und im Rahmen dieser Arbeit mit dem Pegasus-Verfahren. Die elementweise unterschiedlichen, konstanten Korrekturwerte sind in eine stetige Korrekturfunktion $\xi(\mathbf{x}, t_r)$ zu überführen, die lokal unterschiedliche Volumenfehler aus der Reinitialisierung erfasst. Dies erfolgt vereinfachend durch Mittelwertbildung der Korrekturwerte der grenzflächen-geschnittenen Elemente, die an einem betrachteten Knoten des Nahbereiches anliegen. In einem letzten Schritt wird ein Faktor $C(t_r)$ zur globalen Korrektur des Volumenfehlers ermittelt,

$$\Delta V(\phi, \phi^* + C\xi) = \sum_{\Omega_{r,e}^\Sigma} \Delta V_e(\phi, \phi^* + C\xi) = 0 \quad . \quad (3.27)$$

Auch hier erfolgt die Lösung der nichtlinearen Gleichung (3.27) mit dem Pegasus-Verfahren. Die im Nahbereich reinitialisierte Level-Set-Funktion ist dann mit $\check{\phi}(\mathbf{x}, t_r) = \phi^*(\mathbf{x}, t_r) + C(t_r)\xi(\mathbf{x}, t_r)$ gegeben. Der Zeitaufwand zur Volumenkorrektur ist abhängig von der Anzahl der Netzknoten des Nahbereiches und im Allgemeinen vernachlässigbar gegenüber der benötigten Berechnungszeit zur Lösung des physikalischen Problems. Bei annähernder Übereinstimmung von Nullniveauläche $\phi(\mathbf{x}, t_r) = 0$ und Elementknoten bzw. -kante eines Elementes des Nahbereiches ist im Rahmen der Volumenkorrektur ein Wechsel des Vorzeichens $\text{sign}(\phi(\mathbf{x}_k)) \neq \text{sign}(\check{\phi}(\mathbf{x}_k))$ an einem oder mehreren Knoten k des Berechnungsnetzes möglich. Negative Beeinträchtigungen der nachfolgenden Abstandapproximation im Fernbereich, insbesondere bei Verwendung anderer Reinitialisierungsverfahren, sind bei diesen Grenzfällen mit geeigneten Heuristiken bei der Wahl der Elemente des Nahbereiches zu vermeiden.

3.3.4 PDE-Ansatz

Beim PDE-Ansatz nach Sussman et al. [152] wird die explizite Ermittlung der Grenzflächenlage vermieden und stattdessen die instationäre und nichtlineare Advektionsgleichung

$$\frac{\partial \check{\phi}}{\partial \tau} + \text{sign}(\phi_0) \mathbf{n}(\check{\phi}) \cdot \nabla \check{\phi} = \text{sign}(\phi_0) \quad (3.28)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\phi_0(\mathbf{x}, t_r) = \check{\phi}(\mathbf{x}, \tau = 0) = \phi(\mathbf{x}, t_r) \quad (3.29)$$

in künstlicher Zeit τ gelöst. Die stationäre Lösung von Gleichung (3.28) ist die vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion zur implizit mit $\phi(\mathbf{x}, t_r) = 0$ gegebenen Grenzfläche und stellt sich nach vorzeichengerechtem Transport der Eigenschaft $\mathbf{n}(\check{\phi}) \cdot \nabla \check{\phi} = \|\nabla \check{\phi}\| = 1$ von der Grenzfläche ins Gebiet ein. Aus Gründen der Stabilität numerischer Berechnungen ist es notwendig, die mit (3.8) definierte sprungbehaftete Signum-Funktion in (3.28) zu regularisieren. Dies führt jedoch dazu, dass die initiale Grenzflächenlage während der Lösung von Gleichung (3.28) nicht erhalten bleibt, wodurch zusätzliche Fehler in der Volumenerhaltung auftreten. Dieser Effekt kann mit Formulierung entsprechender Nebenbedingungen minimiert werden, wie z. B. von Sussman & Fatemi [150] gezeigt. Besonders bei Aufgabenstellungen in drei Raumdimensionen ist die Vermeidung der Lokalisierung der Grenzfläche beim PDE-Ansatz von großem Vorteil, der numerische Aufwand zur Lösung von Gleichung (3.28) ist jedoch nicht zu vernachlässigen. Zur Reduktion numerischer Kosten ist es sinnvoll, die Abstandsfunktion lediglich in einem schmalen Band um die Grenzfläche zu reinitialisieren [119].

3.3.5 Lokale Grenzflächenprojektion

Auch die von Parolini [118] vorgestellte Reinitialisierung mit lokaler Grenzflächenprojektion ist ein Verfahren ohne explizite Lageermittlung der Grenzfläche. Ausgehend von der degenerierten Abstandsfunktion $\phi(\mathbf{x}, t_r)$ der Level-Set-Lösung in finiten Dreieckselementen mit räumlich linearen Ansätzen ist die vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion $\check{\phi}_e(\mathbf{x}, t_r)$ in einem Element $e \in \mathcal{E}^\Sigma$ des Nahbereiches mit

$$\check{\phi}_e(\mathbf{x}, t_r) = \frac{\phi(\mathbf{x}, t_r)}{\|\nabla \phi(\mathbf{x}, t_r)\|} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_{r,e}^\Sigma \quad (3.30)$$

ohne Veränderung der Grenzflächenlage auf Elementebene und unter Verwendung der L_2 -Norm $\|\nabla \phi(\mathbf{x}, t_r)\|$ des Gradientenvektors der Level-Set-Funktion exakt wiederherstellbar. Die Anwendung von (3.30) auf alle grenzflächenbeherbergenden Elemente führt jedoch auf C_0 -unstetige Verläufe von $\check{\phi}(\mathbf{x}, t_r)$ über die Elementkanten dieser Elemente. Zur Ermittlung C_0 -stetiger Verläufe überführt Parolini Gleichung (3.30) in eine Variationsformulierung, die lediglich im Nahbereich aufgestellt und gelöst wird,

$$\int_{\Omega_r^\Sigma} \delta \check{\phi} \check{\phi} \, d\Omega - \int_{\Omega_r^\Sigma} \delta \check{\phi} \frac{\phi}{\|\nabla \phi\|} \, d\Omega = 0 \quad \forall \delta \check{\phi} \quad (3.31)$$

Dieser Ansatz stellt im Rahmen der gewählten L^2 -Projektion der kantenunstetigen Lösung von (3.30) auf den Raum der kantenstetigen linearen Ansatzfunktionen die beste Approximation der vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion im Nahbereich dar. Parolini untersucht das Verfahren bezüglich der Volumenerhaltung an verschiedenen Testbeispielen und zeigt, dass die erzielten Ergebnisse um teilweise mehr als eine Größenordnung genauer sind als bei Anwendung der direkten Methode. Der Zeitaufwand zur Lösung von (3.31) ist abhängig von der Anzahl der Netzknoten des Nahbereiches und im Allgemeinen vernachlässigbar gegenüber der benötigten

Berechnungszeit zur Lösung des physikalischen Problems. Die Ermittlung neuer Abstandswerte außerhalb des Nahbereiches erfordert alternative Reinitialisierungsverfahren [118, 161], wie z. B. den PDE-Ansatz (3.28) oder die in Abschnitt 3.3.6 dargestellte Fast-Marching-Methode. Die annähernde Übereinstimmung von Nullniveaufläche $\phi(\mathbf{x}, t_r) = 0$ und Elementknoten bzw. -kante eines Elementes des Nahbereiches kann im Rahmen der lokalen Grenzflächenprojektion (3.31) zum Wechsel des Vorzeichens $\text{sign}(\phi(\mathbf{x}_k)) \neq \text{sign}(\check{\phi}(\mathbf{x}_k))$ an einem oder mehreren Knoten k des Berechnungsnetzes führen. Um negative Beeinträchtigungen der nachfolgenden Abstandapproximation im Fernbereich zu vermeiden, sind entsprechende Grenzfälle mit geeigneten Heuristiken bei der Wahl der Elemente des Nahbereiches zu berücksichtigen.

3.3.6 Fast-Marching-Methode

Ein effektives Verfahren zur näherungsweisen Reinitialisierung von Abstandsfunktionen außerhalb des Nahbereiches ist die von Sethian [135] vorgestellte Fast-Marching-Methode. Diese dient der näherungsweisen Lösung der allgemeinen nichtlinearen Eikonalgleichung

$$\|\nabla \check{\phi}(\mathbf{x}, t_r)\| = f(\mathbf{x}, t_r) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_r \quad (3.32)$$

in einem Gebiet Ω_r mit eingebetteter Fläche Γ_r , auf der die Randbedingung $\check{\phi}(\mathbf{x}, t_r) = g(\mathbf{x}, t_r)$, $\forall \mathbf{x} \in \Gamma_r$ eingebracht ist. Die Geschwindigkeitsfunktion $f(\mathbf{x}, t_r) > 0$ ist dabei bekannt. Für die Abstandsberechnung zur Grenzfläche $\Sigma_r = \Gamma_r$ folgt die Randbedingung $g(\mathbf{x}, t_r) = 0$ und die konstante Geschwindigkeitsfunktion $f(\mathbf{x}, t_r) = 1$,

$$\|\nabla \check{\phi}(\mathbf{x}, t_r)\| = 1 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_r \quad . \quad (3.33)$$

Das Verfahren gründet auf der Tatsache, dass mit bekannter Abstandslösung an einzelnen Knoten des Berechnungsgebietes die noch unbekannten Abstandswerte an dazu benachbarten Knoten mit Auswertung von Gleichung (3.33) approximiert werden können. Die Genauigkeit der Abstandsbestimmung ist dabei mit der Ansatzordnung zur Lösung der Eikonalgleichung festgelegt. Der Informationsfluss von niedrigeren zu höheren Abstandswerten wird ausgenutzt, indem nur Werte verwendet werden, die einem Upwind-Kriterium genügen.

Methodik. Das Verfahren setzt sich aus einem Initialisierungsschritt und einem Konstruktionsschritt zusammen. Während des Initialisierungsschrittes erfolgt

- die Ermittlung von Abstandswerten an allen Knoten des Nahbereiches mit geeigneten Reinitialisierungsverfahren und die Kennzeichnung dieser Knoten als „akzeptiert“,
- die Kennzeichnung dazu benachbarter Knoten als „zu prüfen“ und die Ermittlung approximativer Abstandswerte an den „zu prüfenden“ Knoten aus den bereits ermittelten Abstandswerten an „akzeptierten“ Knoten,
- die Kennzeichnung aller anderen Knoten der Diskretisierung als „unbekannt“.

Im anschließenden Konstruktionsschritt erfolgt

- die Suche nach dem „zu prüfenden“ Knoten mit dem kleinsten approximierten Abstandswert und die Umkennzeichnung dieses Knotens als „akzeptiert“,
- die Kennzeichnung aller dazu benachbarten Knoten als „zu prüfen“ und wenn notwendig, die Berechnung neuer, approximativer Abstandswerte an diesen Knoten,
- die Wiederholung dieser Prozedur, bis alle Knoten der Diskretisierung als „akzeptiert“ markiert sind.

Damit ist sichergestellt, dass der in jeder Iteration des Konstruktionsschrittes „akzeptierte“ Wert der Abstandsfunktion den besten Näherungswert des jeweils betrachteten Knotens darstellt. Die Effizienz des Verfahrens resultiert aus einer minimalen Bearbeitungshäufigkeit bei der Berechnung von Abstandswerten eines Knotens, da die Suche nach dem kleinsten approximierten Abstandswert nur in der Menge der „zu prüfenden“ Knoten erfolgt. Dafür ist die Verwendung dynamischer Suchdatenstrukturen zum effizienten Einfügen, Entfernen und Umordnen von Werten notwendig [135]. Im Rahmen dieser Arbeit erfolgt die dynamische Datensuche mit balancierten Suchbäumen [134]. In [77] vergleicht Hysing verschiedene Reinitialisierungsverfahren miteinander und zeigt, dass die Fast-Marching-Methode von allen untersuchten Verfahren den geringsten Zeitaufwand zur Wiederherstellung einer Abstandsfunktion auf unstrukturierten Netzen benötigt. Darüber hinaus ist das Verfahren robust und übertrifft bei Verwendung von Ansätzen 2. Ordnung die Genauigkeit der anderen untersuchten Verfahren.

Abstandsapproximation. Die Berechnung approximativer Abstandswerte auf den in dieser Arbeit verwendeten Diskretisierungen erfolgt mit einem von Sethian & Vladimirsky [136] vorgestellten Differenzenschema auf unstrukturierten Gittern. Damit sind sowohl Näherungen 1. als auch 2. Ordnung möglich. Vereinfachend ist die Kennzeichnung des Reinitialisierungszeitpunktes t_r in den nachfolgenden Ausführungen vernachlässigt. Zur Approximation des Abstandswertes an einem „zu prüfenden“ Knoten am Ort \mathbf{x}_0 werden die Einheitsvektoren

$$\mathbf{n}_i = \frac{\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i\|} \quad , \quad i = \{1, \dots, n\} \quad (3.34)$$

der Orte \mathbf{x}_i der n dazu benachbarten und bereits „akzeptierten“ Knoten in Richtung von \mathbf{x}_0 gebildet. Der Vektor der unbekannten Richtungsableitungen $\mathbf{d} = [d_1 \dots d_n]^T$ der Abstandsfunktion in Richtung der Normalenvektoren $\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_n$ am Punkt \mathbf{x}_0 folgt mit

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{N} \cdot \nabla \check{\phi}(\mathbf{x}_0) \quad . \quad (3.35)$$

Darin ist $\mathbf{N} = [\mathbf{n}_1 \dots \mathbf{n}_n]^T$ die Richtungsmatrix und beinhaltet die Einheitsvektoren (3.34) als Zeilen. Nach Substitution von Gleichung (3.35) in die quadrierte Eikonalgleichung (3.32) folgt

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}_0)^T (\mathbf{N}\mathbf{N}^T)^{-1} \mathbf{d}(\mathbf{x}_0) = f(\mathbf{x}_0)^2 \quad (3.36)$$

als Ausgangsgleichung zur Approximation der allgemeinen Eikonalgleichung auf unstrukturierten Gittern. Die Berechnung der Inversen auf der linken Seite von (3.36) erfordert die Regularität der Richtungsmatrix und infolgedessen linear unabhängige Einheitsvektoren in \mathbf{N} . Damit ist die Anzahl n der zu berücksichtigenden „akzeptierten“ Nachbarknoten auf die Anzahl der

betrachteten Raumdimensionen beschränkt und folglich auch die Abstandapproximation auf Simplexelemente. Bei Verwendung von nicht-Simplexelementen können Simplexe konstruiert werden, siehe z. B. [77]. Der unbekannte Abstandswert $\check{\phi}(\mathbf{x}_0)$ ist in (3.36) mit seinen Richtungsableitungen $d_i(\mathbf{x}_0)$ im Vektor \mathbf{d} ausgedrückt. Die Approximation des Abstandswertes erfolgt mit den in [136] gegebenen Differenzennäherungen 1. oder 2. Ordnung,

$$d_i(\mathbf{x}_0)^{\mathcal{O}(1)} = \underbrace{\frac{1}{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i\|}}_{a_i} \check{\phi}(\mathbf{x}_0) - \underbrace{\frac{\check{\phi}(\mathbf{x}_i)}{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i\|}}_{b_i} , \quad (3.37)$$

$$d_i(\mathbf{x}_0)^{\mathcal{O}(2)} = \underbrace{\frac{2}{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i\|}}_{a_i} \check{\phi}(\mathbf{x}_0) - \underbrace{\frac{2\check{\phi}(\mathbf{x}_i)}{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i\|} - \mathbf{n}_i \cdot \nabla \check{\phi}(\mathbf{x}_i)}_{b_i} . \quad (3.38)$$

Mit den Bezeichnungen a_i und b_i in (3.37) und (3.38) sowie den Vektoren $\mathbf{a} = [a_1 \dots a_n]^T$, $\mathbf{b} = [b_1 \dots b_n]^T$ folgt die Vektorform $\mathbf{d}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{a}\check{\phi}(\mathbf{x}_0) + \mathbf{b}$ der Differenzennäherungen. Nach Substitution in (3.36) und mit $\mathbf{Q} = (\mathbf{N}\mathbf{N}^T)^{-1}$ ist die Umformung der Approximationsgleichung in eine quadratische Gleichung für den unbekannten Abstandswert $\check{\phi}(\mathbf{x}_0)$ möglich,

$$(\mathbf{a}^T \mathbf{Q} \mathbf{a}) \check{\phi}(\mathbf{x}_0)^2 + (2 \mathbf{a}^T \mathbf{Q} \mathbf{b}) \check{\phi}(\mathbf{x}_0) + (\mathbf{b}^T \mathbf{Q} \mathbf{b}) - f(\mathbf{x}_0)^2 = 0 . \quad (3.39)$$

Die Berechnung von Gleichung (3.39) ergibt zwei Nullstellen, von denen die größere als möglicher neuer Abstandswert $\check{\phi}^{\text{neu}}(\mathbf{x}_0)$ infrage kommt. Dafür ist zu prüfen, ob der berechnete Wert kleiner ist als ein eventuell vorher schon berechneter Wert $\check{\phi}^{\text{alt}}(\mathbf{x}_0)$ und ob die charakteristische Richtung $-\nabla \check{\phi}^{\text{neu}}(\mathbf{x}_0)$ des Gradientenvektors im Sinne eines Upwind-Kriteriums in das durch die Knoten $\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_n$ aufgespannte Simplexelement zeigt. Diese Forderung ist erfüllt, wenn alle Komponenten des Vektors $\mathbf{Q} \mathbf{d}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{Q}(\mathbf{a}\check{\phi}^{\text{neu}}(\mathbf{x}_0) + \mathbf{b})$ positiv sind. Die strikte Anwendung des Upwind-Kriteriums kann insbesondere bei Knoten auf dem Rand des Berechnungsgebietes zu große Abstandswerte liefern und findet dort lediglich bei ausgewählten Aufgabenstellungen Berücksichtigung. Bei Näherungen zweiter Ordnung (3.38) ist neben den bekannten Abstandswerten an „akzeptierten“ Knoten auch die Kenntnis des Gradienten der Abstandswerte erforderlich. Der Berechnungsaufwand dafür ist gering, wenn anstelle des angegebenen Upwind-Kriteriums der approximierte Gradient in Gleichung (3.35) verwendet wird,

$$\nabla \check{\phi}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{N}^{-1} \cdot \mathbf{d}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{N}^{-1} \cdot (\mathbf{a}\check{\phi}(\mathbf{x}_0) + \mathbf{b}) , \quad (3.40)$$

und die Gradientenwerte nach Prüfung des Abstands- und des Upwind-Kriteriums für den entsprechenden Knoten gespeichert werden. Problematisch ist jedoch die Ermittlung von Startwerten der Abstandsgradienten an den Knoten des Nahbereiches. Diese sollten möglichst genau sein, da sie maßgeblich die Genauigkeit der späteren Abstandapproximation im Fernbereich bestimmen. Geeignete Verfahren dafür existieren derzeit nicht, sind jedoch notwendig, um Geometrieinformationen der Grenzfläche genauer ermitteln zu können, wie Abschnitt 3.4.2 zeigt. Der Fokus dieser Arbeit liegt jedoch nicht auf der Ermittlung von Grenzflächengeometrieinformationen. Entsprechend ist hier zur Reinitialisierung des Fernbereiches im Allgemeinen die Fast-Marching-Methode mit den Näherungen erster Ordnung (3.37) eingesetzt.

3.3.7 Vergleich verschiedener Nahbereichsreinitialisierungen

Die vorgestellten Reinitialisierungsverfahren für den Nahbereich sind zu untersuchen und hinsichtlich ihrer Volumen- und Lageerhaltungseigenschaften zu vergleichen und zu bewerten. Dabei ist der weit verbreitete PDE-Ansatz (Abschnitt 3.3.4) aufgrund der Vergleiche in [9, 118] sowie der z. B. von Groß [57] beschriebenen Schwierigkeiten bei der Umsetzung dieser Methodik nicht weiter untersucht. Entsprechend sind direkte Methoden mit und ohne Modifikation (Abschnitt 3.3.2) sowie mit und ohne Volumenkorrektur (Abschnitt 3.3.3) und lokale Grenzflächenprojektion (Abschnitt 3.3.5) berücksichtigt. Zur Bestimmung des relativen Lagefehlers wird das von Sussman & Fatemi [150] definierte Fehlermaß

$$E_\phi = \frac{1}{2L_\phi} \int_{\Omega_r} \|\text{sign}(\phi(\mathbf{x})) - \text{sign}(\check{\phi}(\mathbf{x}))\| d\Omega \quad (3.41)$$

verwendet. Darin ist die absolute Lagedifferenz der Level-Set-Funktionen $\phi(\mathbf{x}, t_r)$ vor und $\check{\phi}(\mathbf{x}, t_r)$ nach Reinitialisierung auf die Gesamtlänge L_ϕ der diskreten Grenzflächensegmente vor der Reinitialisierung bezogen. Die Ermittlung des Volumens $V(\phi^+)$ eines Gebietes mit positivem Level-Set-Vorzeichen $\text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t_r)) = 1$ erfolgt mit Gleichung (3.10), wobei $f(\mathbf{x}, t_r) = 1$ gesetzt ist. Die relative Volumenabweichung nach Reinitialisierung folgt dann mit

$$E_{V^+} = \frac{\|V(\phi^+) - V(\check{\phi}^+)\|}{V(\phi^+)} \quad (3.42)$$

als absolute Differenz der Volumina vor und nach Reinitialisierung, bezogen auf das ursprüngliche Volumen. Im betrachteten Beispiel werden die genannten Reinitialisierungsverfahren für den Nahbereich anhand von geometrischen Figuren unterschiedlicher Komplexität und bezüglich der definierten Fehlermaße (3.41) und (3.42) untersucht. Die Reinitialisierung erfolgt auf dem in Bild 3.13 a) dargestellten Quadrat der Kantenlänge $L = 100$ cm, das mit in Koordinatenrichtungen äquidistant angeordneten Knoten regelmäßig diskretisiert ist. Dabei variieren die Knotenabstände von $L/2$ als grösste bis $L/400$ als feinste Diskretisierung. Das Berechnungsnetz mit Knotenabstand $L/20 = 5$ cm ist in Bild 3.13 b) dargestellt.

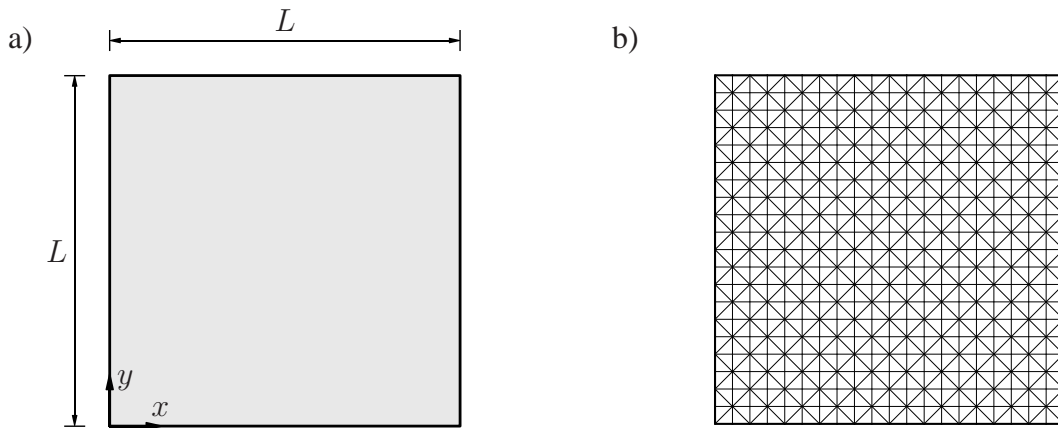


Bild 3.13: Reinitialisierung des Nahbereiches: a) Berechnungsgebiet, b) Diskretisierung.

Die Nullisokonturen und Vorzeichen der zu reinitialisierenden vorzeichenbehafteten Abstandsfunktionen sind in Bild 3.14 dargestellt. Bilder 3.14 a) und b) zeigen die einfachen geometrischen Figuren Kreis und Quadrat, bei denen die Mittelpunkte der Figuren mit dem Mittelpunkt

des Berechnungsgebietes zusammenfallen. Der Durchmesser des Kreises sowie der Abstand paralleler Quadratkanten sind zu $66\frac{2}{3}$ cm gewählt. In den Bildern 3.14 c) und d) sind wieder Kreis und Quadrat als geometrische Grundformen gewählt, wobei die Nullisokontur der Level-Set-Funktion den Rand des Berechnungsgebietes schneidet. Der Schnittpunkt mit beiden Koordinatenachsen beträgt $66\frac{2}{3}$ cm. Für die Berechnungsbeispiele in den Bildern 3.14 e) und f) sind komplexere geometrische Figuren gewählt, die so z. B. im Rahmen von Topologie- und Gestaltänderungen bei der Vereinigung oder Trennung zweier kreisförmiger Gebiete auftreten können. Die Mittelpunkte der sich schneidenden Kreise in Bild 3.14 e) sind zu $(x = 41\frac{2}{3}$ cm, $y = 50$ cm) und $(x = 58\frac{1}{3}$ cm, $y = 50$ cm), die Radien zu 25 cm gewählt. Für das Beispiel in Bild 3.14 f) befinden sich die Kreismittelpunkte im Ursprung und in der diagonal gegenüberliegenden Ecke des Berechnungsgebietes. Der Radius beider Kreise beträgt 75 cm. Bei Anwendung der in Abschnitt 3.3.2 beschriebenen Modifikation der direkten Methode erfolgt die Anpassung an das Verhältnis der ursprünglichen Level-Set-Werte an Elementkanten mit eingeschlossenem Segmentwinkel $\leq 125^\circ$ und bei Randelementkanten unabhängig vom Winkel.

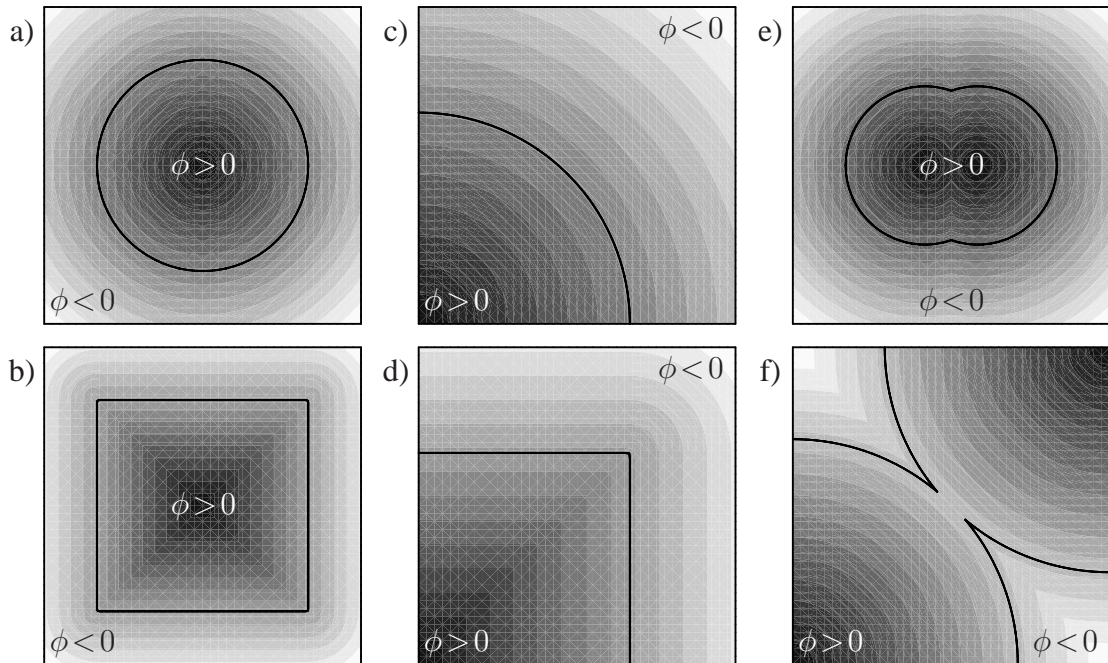


Bild 3.14: Untersuchungsbeispiele zur Reinitialisierung des Nahbereiches.

Lagefehler. Für alle Testfälle ist die Entwicklung des mit (3.41) bestimmten relativen Lagefehlers in Abhängigkeit von der räumlichen Diskretisierungsdichte in Bild 3.15 dargestellt. Im berechnungsrelevanten Bereich konvergiert der Fehler bei allen Verfahren quadratisch gegen Null. Die Testfälle a), c) und e) mit konstanten Krümmungen und moderaten Krümmungssprüngen entlang der Grenzfläche weisen lediglich auf räumlich sehr groben Diskretisierungen Unterschiede zwischen den modifizierten und nicht-modifizierten Methoden auf. Alle Verfahren konvergieren annähernd monoton. Die im Vergleich geringsten Lagefehler zeigt die direkte Reinitialisierung mit Volumenkorrektur nach Mut et al. [108]. Für die Testfälle b) und d) führt die diskrete Initialisierung als Abstandsfunktion zur Ausrundung der Quadratecken. Entsprechend treten Bereiche mit geraden Grenzflächen (Quadratseiten) und Bereiche mit signifikanten Krümmungen und Krümmungsänderungen (Quadratecken) der Grenzfläche auf. Als Folge

treten ausgeprägte Oszillationen in den Konvergenzverläufen aller untersuchten Verfahren auf. Dabei führt die Modifizierung der direkten Methode bei einigen Diskretisierungen zu Verringerungen des Lagefehlers um annähernd eine Größenordnung. Die im Vergleich geringsten Lagefehler zeigt die Reinitialisierung mit lokaler Grenzflächenprojektion.

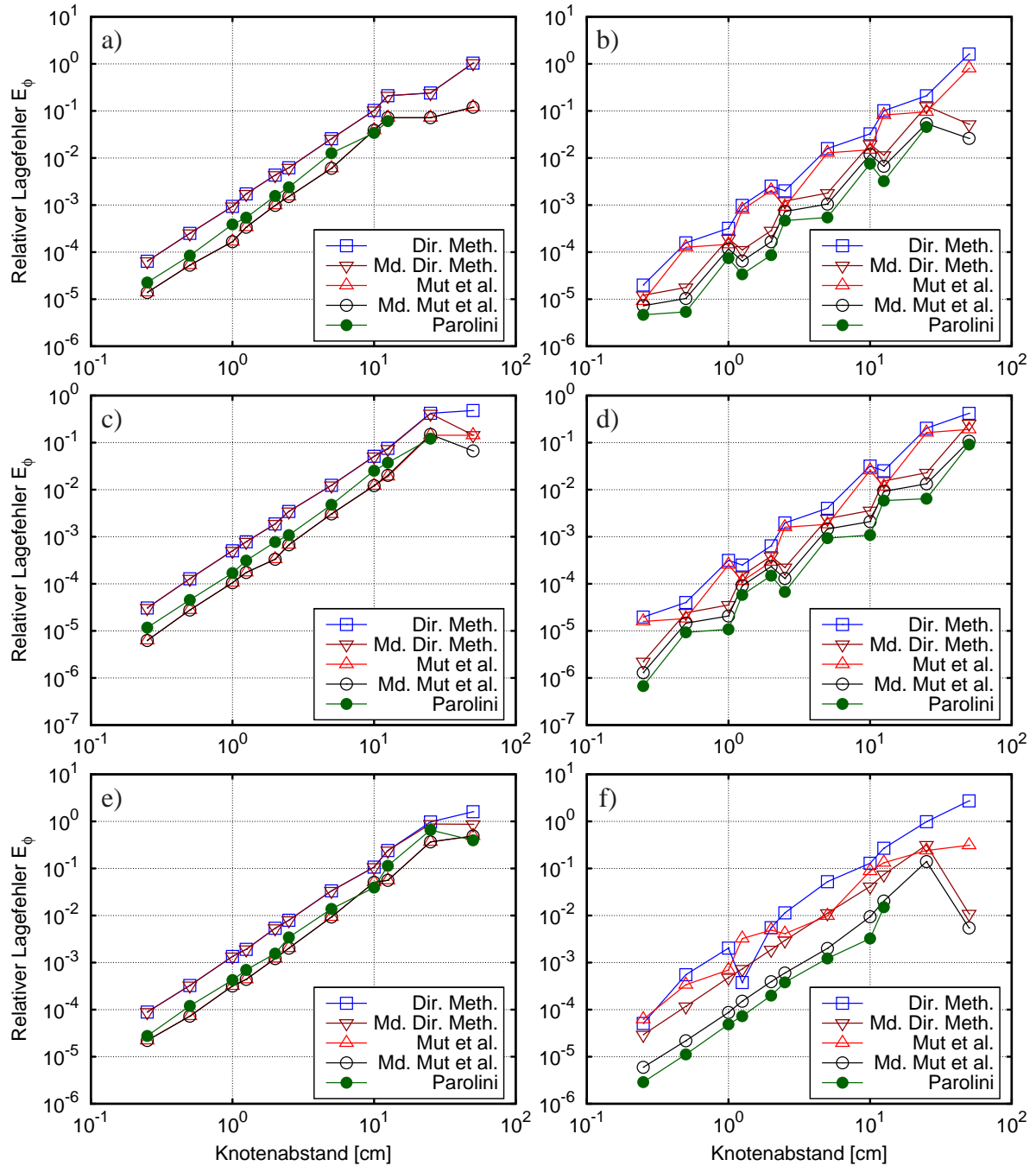


Bild 3.15: Reinitialisierung des Nahbereiches: Relativer Lagefehler E_ϕ für alle Testfälle.

Beim Testfall f) treten wie beim Testfall e) Krümmungssprünge entlang der Grenzfläche auf, jedoch deutlich ausgeprägter. Das direkte Verfahren mit und ohne Volumenkorrektur zeigt oszillierende Konvergenzverläufe, die jedoch moderater sind als in den Testfällen b) und d). Hier führt die Modifizierung der direkten Methode zu annähernd monotonen Konvergenzverläufen

und insbesondere beim Verfahren mit Volumenkorrektur zu Verringerungen des Lagefehlers um annähernd eine Größenordnung. Wie schon für die Testfälle b) und d) weist die Reinitialisierung mit lokaler Grenzflächenprojektion die im Vergleich geringsten Lagefehler auf.

Die Untersuchungen zeigen, dass die modifizierte direkte Methode mit Volumenkorrektur und die lokale Grenzflächenprojektion die geringsten Lagefehler aufweisen und bezüglich der Lageerhaltung gleichwertig sind. Während bei Grenzflächenverläufen mit gleichmäßigen Krümmungsveränderungen und moderaten Krümmungssprüngen die modifizierte direkte Methode mit Volumenkorrektur Vorteile bietet, ist die lokale Grenzflächenprojektion bei lediglich lokal auftretenden signifikanten Krümmungen und Krümmungssprüngen besser geeignet. Die recht einfache Modifikation der direkten Methode hat einen deutlich positiven Effekt auf die Größe des Lagefehlers, wie die Testfälle b), d) und f) zeigen.

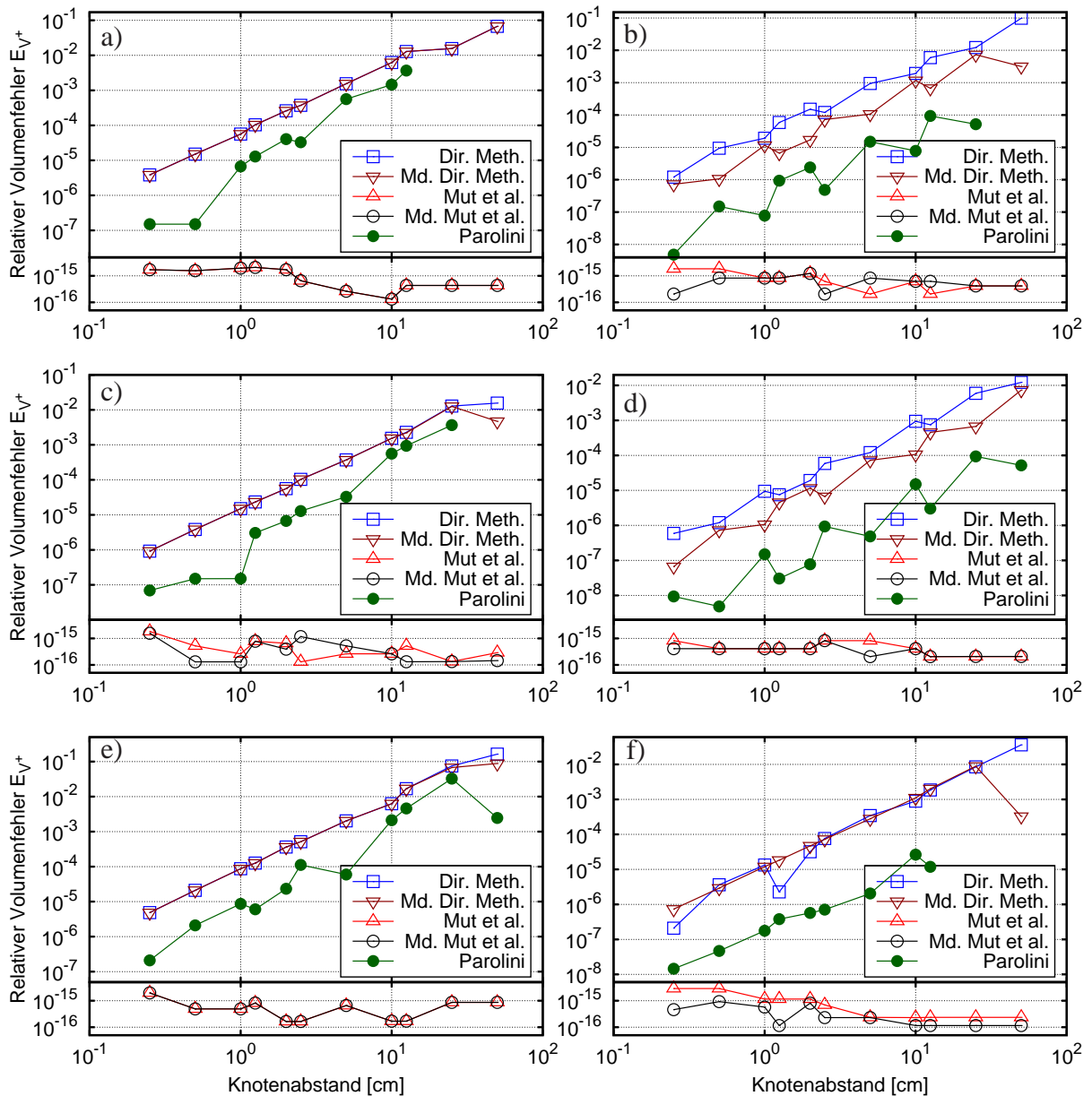


Bild 3.16: Reinitialisierung des Nahbereiches: Relativer Volumenfehler E_{V+} für alle Testfälle.

Volumenfehler. Für alle Testfälle ist die Entwicklung des mit (3.42) bestimmten relativen Volumenfehlers in Abhängigkeit von der Auflösung der räumlichen Diskretisierung in Bild 3.16 dargestellt. Bei Anwendung der Volumenkorrektur bewegt sich der Volumenfehler in der Größenordnung der Rechengenauigkeit und ist für Konvergenzbetrachtungen nicht relevant.

Bei allen Testfällen konvergiert die direkte Methode mit und ohne Modifikation annähernd quadratisch gegen Null. Die Konvergenz ist bei den Testfällen a), c), e) und f) annähernd monoton und bei den Testfällen b) und d) moderat oszillierend. Die lokale Grenzflächenprojektion weist in allen Testfällen deutlich geringere Volumenfehler auf, die Konvergenzverläufe sind jedoch auch deutlich oszillationsbehafteter als bei den direkten Methoden. Für die Testfälle b) und d) zeigt die lokale Grenzflächenprojektion annähernd quadratisches Konvergenzverhalten, während die Konvergenzordnung in den Testfällen a), c) und e) deutlich größer und beim Testfall f) etwas kleiner als Zwei ist. Daraus lässt sich mit Blick auf die Konvergenzordnung des Volumenfehlers schlussfolgern, dass Reinitialisierungen mit lokaler Grenzflächenprojektion bei gleichmäßigen Krümmungen und moderaten Krümmungsänderungen und -sprüngen entlang der Grenzfläche deutlich besser geeignet sind als bei signifikanten Krümmungsänderungen und -sprüngen im Grenzflächenverlauf. Die Modifikation der direkten Methode hat in den Testfällen b) und d) einen positiven Einfluss auf die Größe des Volumenfehlers und beim Testfall e) einen positiven Einfluss auf die Monotonie des Konvergenzverhaltens.

Die Untersuchungen zeigen, dass Verfahren mit Volumenkorrektur die kleinsten Volumenfehler aufweisen und dass von den Verfahren ohne Volumenkorrektur die lokale Grenzflächenprojektion mit den geringsten Volumenfehlern behaftet ist. Die Konvergenzordnung des Verfahrens ist jedoch von der Ausprägung von Krümmungsänderungen und -sprüngen entlang der Grenzfläche abhängig. Die Modifikation der direkten Methode wirkt sich positiv auf die Größe des Volumenfehlers bzw. die Monotonie des Konvergenzverhaltens aus.

Aufgrund der Untersuchungen dieses Abschnittes ist zur Reinitialisierung des Nahbereiches im Rahmen dieser Arbeit die direkte Methode mit Volumenkorrektur und Modifikation in Bereichen großer Krümmungen gewählt. Die lokale Grenzflächenprojektion ist dem Verfahren bezüglich der Lageerhaltung zwar gleichwertig, weist jedoch Defizite bei der Volumenerhaltung auf. Ein möglicher Ansatz zur Verringerung des Volumenfehlers bei lokalen Grenzflächenprojektionen ist ein nachgeschalteter Volumenkorrekturschritt, ähnlich dem von Smolianski [142] vorgestellten Verfahren. Die Ergebnisse der Lageerhaltung sind dann jedoch neu zu beurteilen.

3.4 Ermittlung von Geometrieinformationen

Wie bereits in Abschnitt 3.2.3 ausgeführt, treten bei Aufgabenstellungen mit oberflächengekoppelten Teilkontinua Interaktionsterme auf, die Geometrieinformationen des Kopplungsrandes und im Speziellen dessen Orientierung und Krümmung beinhalten. Im Rahmen der hier verwendeten Level-Set-Methodik ist mit den Gleichungen (3.6) und (3.7) grundsätzlich die Möglichkeit der direkten Ermittlung von Geometrieinformationen gegeben, wenn der verwendete Ansatzraum dies zulässt und der Genauigkeitsverlust durch Differentiation vernachlässigbaren Einfluss auf die Genauigkeit der Gesamtlösung besitzt. Da diese Voraussetzungen mit den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten linearen Ansätzen nicht erfüllt sind, ist zur Krümmungsbe-

rechnung die Verwendung spezieller Gradientenmittlungs- oder -wiederherstellungsverfahren notwendig. Hierfür werden globale L^2 -Projektionen sowie die Verfahren nach Zienkiewicz und Zhu [166] (ZZ-PR), nach Zhang [164] (PPR) sowie nach Huang & Yi [70] (SCR) vorgestellt und bezüglich der Lösungsgenauigkeit untersucht und miteinander verglichen. Die Möglichkeit der Verwendung von Laplace-Beltrami-Operatoren im Rahmen schwacher Formulierungen ist in diesem Abschnitt nicht verfolgt, vergleichende Untersuchungen mit der ZZ-PR-Methodik am Beispiel einer stehenden Kapillarwelle sind jedoch in Abschnitt 5.3 durchgeführt.

3.4.1 Methoden zur Geometrieermittlung

L^2 -Projektionen. Im Rahmen von L^2 -Projektionen erfolgt die Näherung d_i der partiellen Ableitung $\frac{\partial v(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i}$ einer Größe $v(\mathbf{x}, t)$ nach der Raumkoordinate x_i mit der schwachen Form

$$\int_{\Omega_t} \delta d_i d_i \, d\Omega - \int_{\Omega_t} \delta d_i \frac{\partial v}{\partial x_i} \, d\Omega = 0 \quad \forall \delta d_i . \quad (3.43)$$

Dafür ist der Ansatzraum der Ableitung gleich dem Ansatzraum der abzuleitenden Größe gewählt. Alternativ ist Gleichung (3.43) auch knotenweise anwendbar und führt auf separat auszuwertende Integralgleichungen für jeden Knoten der Diskretisierung. Das Integrationsgebiet eines Knotens besteht dann aus den finiten Elementen, die als lokale Träger der Ansatzfunktionen des betrachteten Knotens dienen (Knotenpatch). Anstelle lokaler L^2 -Projektionen sind im Rahmen dieser Arbeit die genannten Wiederherstellungsverfahren untersucht, die auf der lokalen Methode der kleinsten Quadrate gründen.

Methode der kleinsten Quadrate. Betrachtet wird die Diskretisierung des zweidimensionalen räumlichen Berechnungsgebietes Ω_t zum Zeitpunkt t . Die Menge der Knoten der Diskretisierung ist mit \mathcal{N} bezeichnet. In der lokalen Umgebung eines Knotens $k \in \mathcal{N}$ am Ort \mathbf{x}_0 befinden sich n verschiedene Samplingpunkte $\mathbf{x}_i, i = \{1, \dots, n\}$ an denen Funktionswerte $f_i = f(\mathbf{x}_i)$ vorliegen, die aus der diskreten Lösung ermittelt sind. Die Aufgabe besteht darin, mit den vorhandenen Werten f_i einen Funktionswert $f_0 = f(\mathbf{x}_0)$ am betrachteten Knoten zu approximieren. Dafür ist eine Funktion zu finden, die die Funktionswerte f_i möglichst exakt annähert und damit eine gute Approximation des Wertes f_0 am betrachteten Knoten ermöglicht. Im Rahmen der in dieser Arbeit untersuchten Verfahren sind dafür Polynome $P(\mathbf{x}) = \mathbf{P}_p \cdot \mathbf{a}_p$ gewählt. Darin ist p die Polynomordnung, \mathbf{P}_p der Vektor der entsprechenden Polynomterme und \mathbf{a}_p der Vektor der zugehörigen Polynomkoeffizienten. Für lineare Polynome mit $p = 1$ und quadratische Polynome mit $p = 2$ sind die jeweiligen Vektoren in zwei Raumdimensionen angegeben,

$$\mathbf{P}_1 = [1 \ x \ y]^T, \quad \mathbf{a}_1 = [a_1 \ a_2 \ a_3]^T, \quad (3.44)$$

$$\mathbf{P}_2 = [1 \ x \ y \ x^2 \ xy \ y^2]^T, \quad \mathbf{a}_2 = [a_1 \ a_2 \ a_3 \ a_4 \ a_5 \ a_6]^T. \quad (3.45)$$

Polynomterme von Polynomen höherer Ordnung lassen sich z. B. mit dem Pascal'schen Dreieck ermitteln. Die Polynomkoeffizienten der minimalen Fehlerquadratsumme folgen mit

$$\min_{\mathbf{a}_p} \sum_{i=1}^n (\mathbf{P}_p(\mathbf{x}_i) \cdot \mathbf{a}_p - f_i)^2. \quad (3.46)$$

Nach Auswertung von (3.46) liegt ein lineares Gleichungssystem

$$\mathbf{A} \mathbf{a}_p = \mathbf{b} \quad \text{mit} \quad \mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \mathbf{P}_p(\mathbf{x}_i) \mathbf{P}_p^T(\mathbf{x}_i) \quad \text{und} \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \mathbf{P}_p(\mathbf{x}_i) f_i \quad (3.47)$$

zur Ermittlung der Polynomkoeffizienten vor. Diese quadratische Anpassung (least-squares fitting) führt auf Polynome $P(\mathbf{x})$, mit denen die lokal vorhandenen Funktionswerte f_i entsprechend der gewählten Polynomordnung optimal angenähert sind. Der zu approximierende Funktionswert folgt dann nach Auswertung des ermittelten Polynoms am betrachteten Knoten, $f_0 = P(\mathbf{x}_0)$. Bei großen Koordinatenwerten oder kleinen Koordinatenabständen besteht die Gefahr schlecht konditionierter Koeffizientenmatrizen \mathbf{A} , mit denen Lösungen des Gleichungssystems selbst bei direkten Gleichungslösern stark rundungsbehaftet bzw. unbrauchbar sein können. Um dies zu vermeiden, werden die Gleichungssysteme mit normierten Koordinaten

$$\xi_i = \frac{x_i - x_0}{h} \quad \text{und} \quad \eta_i = \frac{y_i - y_0}{h} \quad , \quad \mathbf{x}_i = (x_i, y_i) \quad , \quad \mathbf{x}_0 = (x_0, y_0) \quad (3.48)$$

aufgestellt. Darin ist $h = \max \{ \text{dist}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_0) \mid i \in \{1, \dots, n\} \}$ der größte euklidische Abstand zu den Samplingpunkten. Die Mindestanzahl der Samplingpunkte entspricht der Anzahl der Polynomkoeffizienten des gewählten Polynoms. Darüber hinaus ist darauf zu achten, dass die geometrischen Orte der Samplingpunkte nicht auf singuläre Koeffizientenmatrizen führen (z. B. dürfen die Orte aller Samplingpunkte linearer Polynome nicht auf einer Linie liegen).

Wiederherstellungsverfahren. Im Rahmen des ZZ-PR-Wiederherstellungsverfahrens [166] erfolgt die knotenweise Annäherung räumlicher Ableitungen mit den an bestimmten Samplingpunkten innerhalb der Elementgebiete eines Knotenpatches ermittelten Ableitungswerten der Finite-Element-Lösung. Für Dreieckelemente mit linearen Ansatzfunktionen befinden sich die Samplingpunkte in den Schwerpunkten der Elemente. Die Methode der kleinsten Quadrate wird so direkt auf die gesuchten Ableitungswerte angewendet, wobei der Polynomgrad des zu ermittelnden Polynoms gleich der Ordnung der räumlichen Ansatzfunktionen der Finite-Element-Methode gewählt ist. Dieses Vorgehen führt auf ein kostengünstiges und robustes Verfahren mit hoher Genauigkeit und Superkonvergenz auf regelmäßigen Netzen.

Die PPR-Technik [164] ist dem ZZ-PR-Verfahren ähnlich und gründet lediglich auf Wiederherstellungsschritten in umgekehrter Reihenfolge. Zunächst wird mittels quadratischer Anpassung aus der diskret vorliegenden Lösung ein Polynom ermittelt, wobei der Polynomgrad des zu ermittelnden Polynoms eine Ordnung höher gewählt ist als der Grad der Ansatzfunktionen der finiten Elemente. Damit ist es zweckmäßig, umliegende Netzknoten als Samplingpunkte und die dort ermittelten diskreten Knotenwerte der Finite-Element-Lösung als Funktionswerte des anzupassenden Polynoms zu verwenden. Der gesuchte Ableitungswert folgt dann mit Differentiation des ermittelten Polynoms am betrachteten Knoten. Nachteilig an diesem Ansatz ist lediglich der größere numerische Aufwand des Verfahrens durch höhere Polynomansätze und damit einer größeren Anzahl zu verwendender Samplingpunkte.

Wird anstelle eines Polynoms höherer Ordnung ein Polynom von der Ordnung der Ansatzfunktionen der finiten Elemente verwendet, folgt die SCR-Methode [70]. Der numerische Aufwand des Verfahrens ist zwar geringer, aufgrund niedrigerer Ansatzordnungen ist das SCR-Verfahren jedoch auf symmetrisch um den betrachteten Knoten angeordnete Samplingpunkte beschränkt.

3.4.2 Vergleich verschiedener Verfahren

Die in Abschnitt 3.4.1 vorgestellten Verfahren sind zu untersuchen und hinsichtlich ihrer Genauigkeit und Konvergenzeigenschaften bei der Berechnung bekannter Normalenvektor- und Krümmungsfelder zu vergleichen und zu bewerten. Dafür ist als Beispiel eine Kreisfunktion gewählt. Mit dem Kreismittelpunkt \mathbf{x}_M und dem Kreisradius r folgt die allgemeine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion $\phi_K(\mathbf{x})$ des Kreises sowie daraus abgeleitet mit (3.6) das Einheitsnormalenvektorfeld $\mathbf{n}_K(\mathbf{x})$ und mit (3.7) das Krümmungsfeld $\kappa_K(\mathbf{x})$,

$$\phi_K(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_M\| - r \quad , \quad \mathbf{n}_K(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_M}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_M\|} \quad , \quad \kappa_K(\mathbf{x}) = \frac{1}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_M\|^3} \quad . \quad (3.49)$$

Der relative Einheitsnormalenvektorfehler E_n ist im Rahmen dieser Arbeit mit

$$E_n = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \|\mathbf{n}_K^{\text{ana}}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{n}_K^{\text{num}}(\mathbf{x}_i)\|^2}{\sum_{i=1}^n \|\mathbf{n}_K^{\text{ana}}(\mathbf{x}_i)\|^2}} \quad (3.50)$$

berechnet. Darin ist $\mathbf{n}_K^{\text{ana}}(\mathbf{x}_i)$ der analytisch und $\mathbf{n}_K^{\text{num}}(\mathbf{x}_i)$ der numerisch ermittelte Einheitsnormalenvektor am Ort \mathbf{x}_i eines Netzknotens k_i . Die Summation erfolgt lediglich über die n Knoten $k_i, i = \{1, \dots, n\}$ der in Abschnitt 3.3 definierten Knotenmenge \mathcal{N}^Σ des Nahbereiches, da lediglich mit diesen Knotenwerten Normalenvektoren und Krümmungen der Grenzfläche ermittelt werden. Mit der analytischen Lösung $\kappa_K^{\text{ana}}(\mathbf{x}_i)$ und der numerischen Lösung $\kappa_K^{\text{num}}(\mathbf{x}_i)$ der Krümmungswerte folgt der relative Krümmungsfehler E_κ analog,

$$E_\kappa = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\kappa_K^{\text{ana}}(\mathbf{x}_i) - \kappa_K^{\text{num}}(\mathbf{x}_i))^2}{\sum_{i=1}^n (\kappa_K^{\text{ana}}(\mathbf{x}_i))^2}} \quad . \quad (3.51)$$

Die Berechnung erfolgt wie bereits bei der Untersuchung verschiedener Reinitialisierungsverfahren auf einem Quadrat der Kantenlänge $L = 100$ cm, das mit in Koordinatenrichtungen äquidistant angeordneten Knoten regelmäßig diskretisiert ist, siehe Bild 3.13.

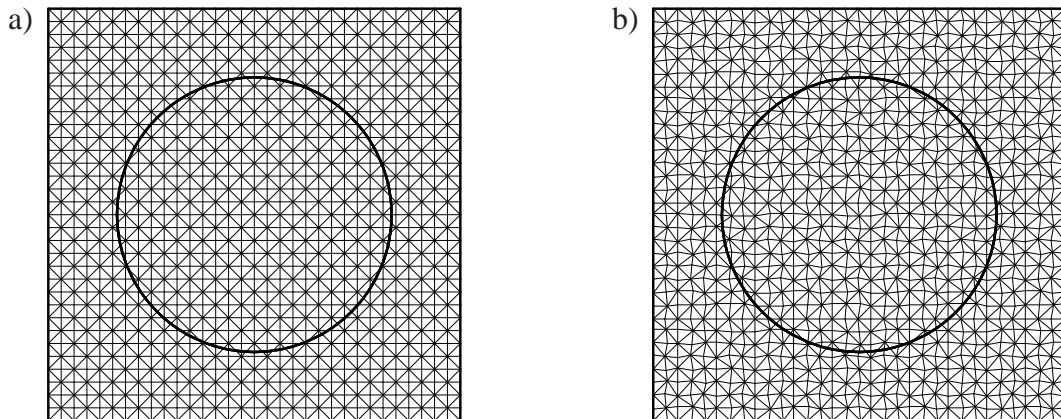


Bild 3.17: Koordinatenparallele Kantenlängen $L/32$ cm: a) regelmäßige und b) gestörte Diskretisierung.

Die Knotenabstände variieren von $L/8$ als grösste bis $L/1024$ als feinste Diskretisierung. Zusätzlich zu regelmäßigen Netzen mit Elementen gleicher Größe werden in diesem Beispiel

auch die Auswirkungen gestörter Netze auf die Güte der Lösung untersucht. Beispielhaft ist in Bild 3.17 a) die regelmäßige Diskretisierung mit Knotenabständen $L/32 = 3,125$ cm dargestellt und in Bild 3.17 b) die entsprechende gestörte Diskretisierung. Der Mittelpunkt des gewählten Kreises fällt mit dem Mittelpunkt des Berechnungsgebietes zusammen, wobei der Radius zu $r = 33 \frac{1}{3}$ cm gewählt ist. Da der Gradient der Level-Set-Funktion im Allgemeinen nicht auf Einheitsnormalenvektoren führt, sind im Rahmen numerischer Berechnungen das Normalenvektorfeld $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ und das Einheitsnormalenvektorfeld $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ zu unterscheiden,

$$\mathbf{N}(\mathbf{x}) = \nabla \phi(\mathbf{x}) \quad , \quad \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{N}(\mathbf{x})}{\|\mathbf{N}(\mathbf{x})\|} \quad . \quad (3.52)$$

Entsprechend erfolgen numerische Krümmungsberechnungen mit dem ermittelten Normalenvektorfeld sowie dessen Ableitungen,

$$\kappa(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{N}(\mathbf{x})}{\|\mathbf{N}(\mathbf{x})\|} \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{N}(\mathbf{x})}{\|\mathbf{N}(\mathbf{x})\|} - \mathbf{N}(\mathbf{x}) \cdot \frac{(\nabla \mathbf{N}(\mathbf{x}))^T \cdot \mathbf{N}(\mathbf{x})}{\|\mathbf{N}(\mathbf{x})\|^3} \quad . \quad (3.53)$$

Relativer Einheitsnormalenvektorfehler. Für die untersuchten Testfälle ist die Entwicklung des mit (3.50) bestimmten relativen Einheitsnormalenvektorfehlers in Abhängigkeit von der räumlichen Diskretisierungsdichte in Bild 3.18 dargestellt.

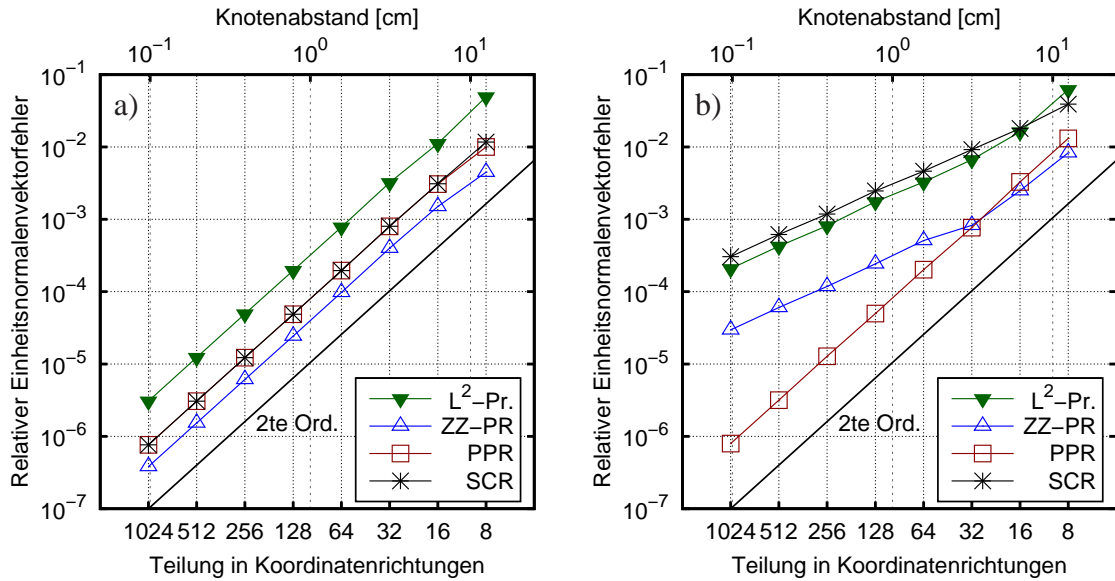


Bild 3.18: Relativer Einheitsnormalenvektorfehler: a) regelmäßige und b) gestörte Diskretisierung.

Auf regelmäßig diskretisierten Netzen konvergieren alle untersuchten Verfahren quadratisch gegen Null, Bild 3.18 a). ZZ-PR-Verfahren sind dabei um den Faktor Zwei genauer als PPR- und SCR-Verfahren, deren Genauigkeitsfehler sich nur minimal unterscheiden. Mit globalen L^2 -Projektionen sind die Ergebnisse der ermittelten Einheitsnormalenvektorwerte um eine Größenordnung ungenauer als mit dem ZZ-PR-Verfahren. Auf gestörten Netzen konvergiert das PPR-Verfahren quadratisch gegen Null und weist damit für fein diskretisierte Berechnungsgebiete die genauesten Einheitsnormalenvektorwerte auf, Bild 3.18 b). Im Bereich grober Diskretisierungen ist lediglich das ZZ-PR-Verfahren genauer, dessen Konvergenzordnung jedoch mit

feiner werdender Diskretisierung auf Eins abfällt. Die Konvergenzverläufe der Fehler aus L^2 -Projektionen und des ZZ-PR-Verfahrens sind einander ähnlich, unterscheiden sich jedoch wie schon auf regelmäßigen Ortsdiskretisierungen um eine Größenordnung. Das SCR-Verfahren weist die ungenauesten Ergebnisse auf und konvergiert auf gestörten Netzen lediglich linear.

Relativer Krümmungsfehler. Die Berechnung der Krümmungen erfolgt mit (3.53), wobei dafür die zuvor ermittelten Normalenvektoren sowie deren Ableitungen benötigt sind. Die Entwicklung des mit (3.51) bestimmten relativen Krümmungsfehlers ist in Abhängigkeit von der räumlichen Auflösung der Ortsdiskretisierungen in Bild 3.19 dargestellt.

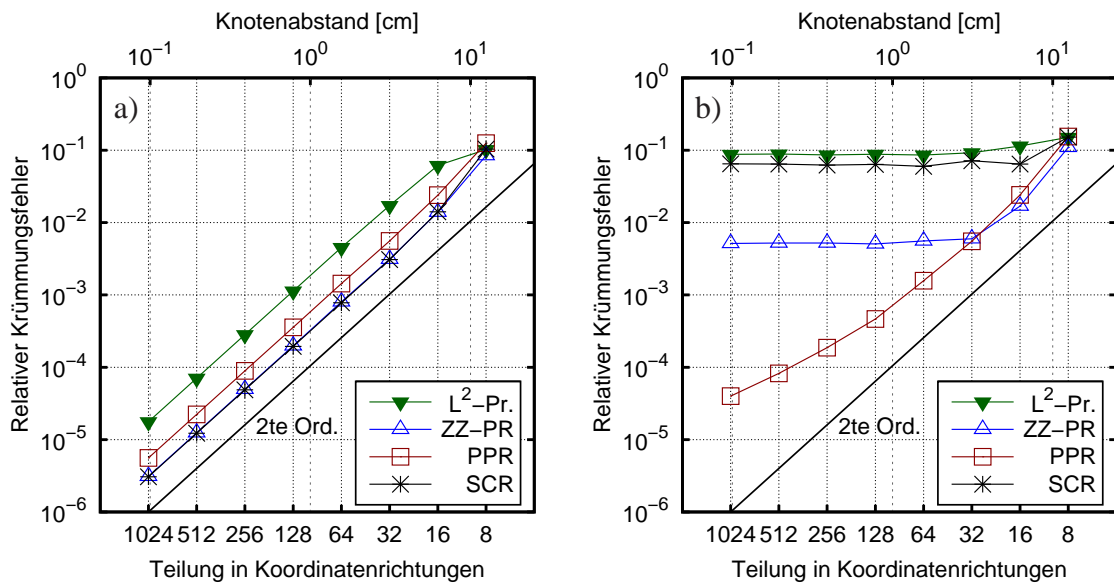


Bild 3.19: Relativer Krümmungsfehler: a) regelmäßige und b) gestörte Diskretisierung.

Wie schon bei der Berechnung der Einheitsnormalenvektorfehler konvergieren die Fehler aller untersuchten Verfahren auch bei der Krümmungsberechnung auf regelmäßigen Netzen quadratisch gegen Null, Bild 3.19 a). Gegenüber der Einheitsnormalenvektorberechnung tritt lediglich ein Abfall in der Genauigkeit auf, wobei die Genauigkeitsverhältnisse der einzelnen Verfahren prinzipiell bestehen bleiben. Lediglich das SCR-Verfahren verzeichnet einen geringeren Abfall in der Genauigkeit und weist damit ähnlich genaue Krümmungswerte wie das ZZ-PR-Verfahren auf. Die in Bild 3.19 b) dargestellten Ergebnisse der Berechnung auf gestörten Netzen hingegen zeigen einen Abfall in der Konvergenzordnung aller Verfahren. Die genauesten Krümmungswerte weist das PPR-Verfahren auf, das auf grob diskretisierten Netzen zwar quadratisch konvergiert, dessen Konvergenzordnung mit zunehmender Diskretisierungsdichte jedoch auf Eins abfällt. Die mit dem ZZ-PR-Verfahren ermittelten Krümmungen hingegen weisen nach ursprünglich auf groben Netzen noch vorhandener Konvergenz auf feineren Ortsdiskretisierungen keine Konvergenz mehr auf. Die schlechtesten Ergebnisse weisen SCR-Verfahren und L^2 -Projektionen auf, die ebenfalls nicht konvergieren.

Die Ergebnisse der Untersuchungen zur Ermittlung von Geometrieigenschaften bestätigen die Ergebnisse der Untersuchungen von Hysing [77] und zeigen die Überlegenheit der PPR-Methodik gegenüber anderen Verfahren zur Ermittlung verbesserter Ableitungswerte. Dies hängt damit zusammen, dass die vorgegebene Abstandsfunktion des Kreises eine Wurzelfunktion

und damit nichtlinear ist, wie im Allgemeinen jegliche Abstandsfunktionen in mehr als einer Raumdimension. Entsprechend sind Berechnungen von Funktionswerten auf Elementebene der gewählten Elemente selbst bei Kenntnis exakter Knotenwerte lediglich Näherungen von Abstandsfunktionen. Die für ZZ-PR-Techniken und L^2 -Projektionen verwendeten Ableitungswerte auf Elementebene sind mit zusätzlichen Genauigkeitsverlusten verbunden. Diese Verfahren eignen sich somit lediglich für regelmäßige Netze, bei denen sich Ableitungsfehler infolge von Symmetrien zu einem gewissen Grad ausgleichen.

Im Gegensatz dazu dienen im Rahmen von PPR- und SCR-Verfahren die genaueren Knotenwerte der Diskretisierung als Ausgangsinformationen. Beim PPR-Verfahren sind die Ansatzräume der quadratischen Anpassung eine Ordnung höher als die FE-Ansatzordnung der abzuleitenden Größe gewählt. Die lokale Abbildung der knotenweise vorhandenen Lösung erfolgt dann auf eine Funktion, mit der die Lösung in der lokalen Umgebung des betrachteten Knotens besser approximiert ist als mit den FE-Ansätzen. Zusätzlich sind Ableitungsermittlungen direkt am betrachteten Knoten möglich. Genauigkeitsverluste des SCR-Verfahrens auf allgemeinen Diskretisierungen sind auf den gleich der FE-Ansatzordnung gewählten Ansatzraum der quadratischen Anpassung zurückzuführen. Die zur Verbesserung der Genauigkeit in [70] vorgeschlagene Verwendung symmetrisch um den betrachteten Knoten gewählter Samplingpunkte auf unregelmäßigen Netzen hat sich im Rahmen des gewählten Beispiels und der verwendeten Diskretisierungen jedoch als nicht zielführend erwiesen.

Ansätze höherer Ordnung. Zur weiteren Verbesserung der Lösungsgüte ist die Verwendung von Polynomfunktionen 3. und 4. Ordnung im Rahmen des PPR-Verfahrens untersucht. Die Ergebnisse der Fehlerkonvergenz auf regelmäßigen und gestörten Netzen sind im Vergleich mit Polynomfunktionen 2. Ordnung für den relativen Einheitsnormalenvektor- und den relativen Krümmungsfehler in den Bildern 3.20 a) und b) dargestellt.

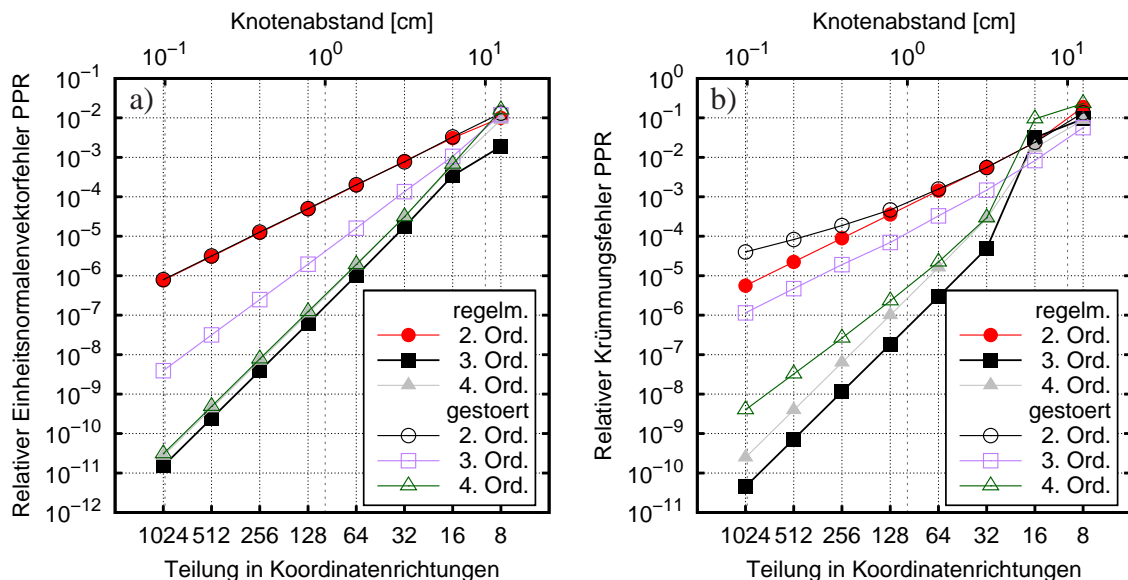


Bild 3.20: Ansätze höherer Ordnung: a) Einheitsnormalenvektorfehler, b) Krümmungsfehler.

Wie Bild 3.20 zeigt, konvergieren Einheitsnormalenvektor- und Krümmungsfehler bei Verwendung von Polynomfunktionen 3. und 4. Ordnung auf regelmäßigen Netzen mit 4. Ordnung gegen Null, wobei Polynomfunktionen 3. Ordnung die genauesten Ergebnisse aufweisen. Bei

Berechnungen auf gestörten Netzen bieten Polynomfunktionen 4. Ordnung Vorteile, da der Normalenvektorfehler weiterhin mit 4. Ordnung und der Krümmungsfehler mit 3. Ordnung gegen Null konvergiert. Die Verwendung von Polynomfunktionen 3. Ordnung führt bei gestörten Netzen lediglich auf Konvergenzordnungen von Drei für den Fehler der Einheitsnormalenvektorberechnungen und Zwei für den Fehler der Krümmungsberechnungen.

Reinitialisierte Abstandsfunktionen. Die bisherigen Berechnungen gründen auf gebietsweit exakt vorgegebenen Knotenwerten der Abstandsfunktion des Kreises (3.49) und belegen, dass mit Wiederherstellungsverfahren äußerst genaue Berechnungen von Geometrieinformationen möglich sind. Im Rahmen der Berechnung physikalischer Prozesse mit Level-Set-Funktionen liegen Abstandswerte jedoch lediglich in degenerierter Form oder als Approximation eines Reinitialisierungsverfahrens vor, so dass die Genauigkeit von Wiederherstellungsverfahren an die Güte der Abstandapproximation in Grenzflächennähe gekoppelt ist. Damit bleibt zu untersuchen, wie sich die Entwicklung von Normalenvektor- und Krümmungsfehlern bei Verwendung reinitialisierter Abstandsfunktionen verhält. Hierfür sind PPR-Verfahren mit Polynomansätzen 2., 3. und 4. Ordnung sowie ZZ-PR- und SCR-Techniken bei Anwendung von Fast-Marching-Methoden mit Differenzennäherungen 1. und 2. Ordnung auf regelmäßigen Netzen untersucht. Die exakten Abstandswerte sowie deren erste und zweite Ableitungen sind lediglich an den Knoten der Knotenmenge \mathcal{N}^Σ des Grenzflächennahbereiches vorgegeben. Die Verwendung gestörter Netze hat sich im Rahmen der Geometrieermittlung mit reinitialisierten Abstandsfunktionen für alle untersuchten Verfahren als nicht zielführend erwiesen und ist damit nicht weiter betrachtet. Auch Globale L^2 -Projektionen sind aufgrund des hohen numerischen Aufwandes zur Lösung globaler Gleichungssysteme und der im Vergleich mit den anderen untersuchten Verfahren geringeren Genauigkeit nicht weiter untersucht. Die Ergebnisse der Fehlerkonvergenz bei Verwendung von Differenzennäherungen 1. Ordnung sind für den relativen Einheitsnormalenvektorfehler in Bild 3.21 a) und für den relativen Krümmungsfehler in Bild 3.21 b) dargestellt.

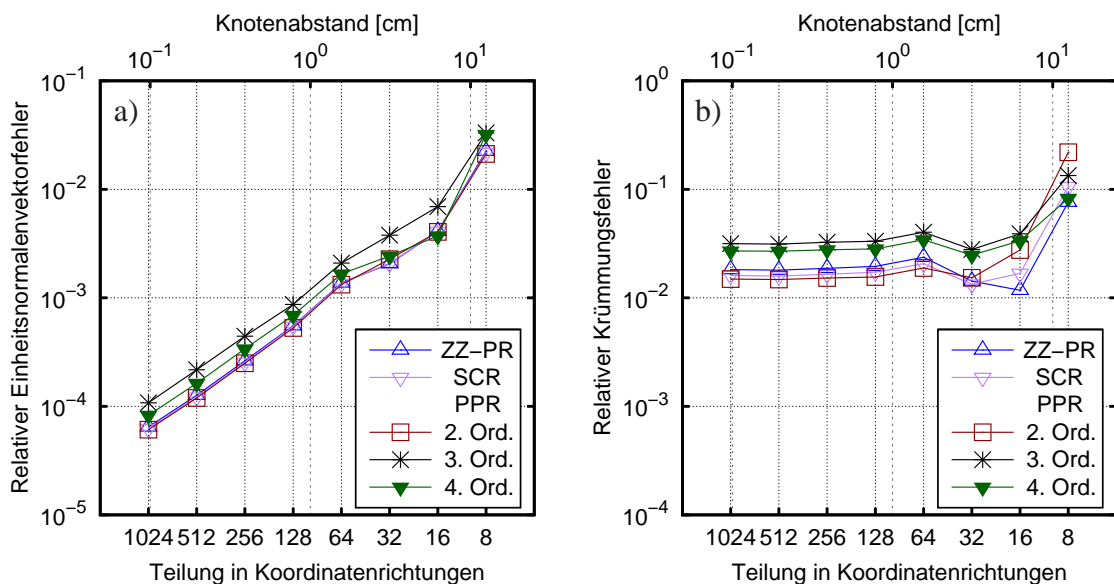


Bild 3.21: Abstandsnäherungen 1. Ordnung: a) Einheitsnormalenvektorfehler, b) Krümmungsfehler.

Wie Bild 3.21 a) zeigt, konvergiert der relative Einheitsnormalenvektorfehler bei Differenzennäherungen 1. Ordnung für alle Verfahren lediglich linear gegen Null. Der relative Krümmungs-

fehler bleibt unabhängig von Diskretisierung und verwendetem Wiederherstellungsverfahren nach anfänglicher Konvergenz konstant, siehe Bild 3.21 b). Die Genauigkeit von PPR-Verfahren mit Polynomansätzen 3. und 4. Ordnung ist im Vergleich mit den anderen untersuchten Verfahren etwas geringer. Damit sind Differenzennäherungen 1. Ordnung zur Berechnung von Krümmungswerten wenig geeignet. Die Ergebnisse der Fehlerkonvergenz bei Verwendung von Differenzennäherungen 2. Ordnung sind für den relativen Einheitsnormalenvektorfehler in Bild 3.22 a) und für den relativen Krümmungsfehler in Bild 3.22 b) dargestellt.

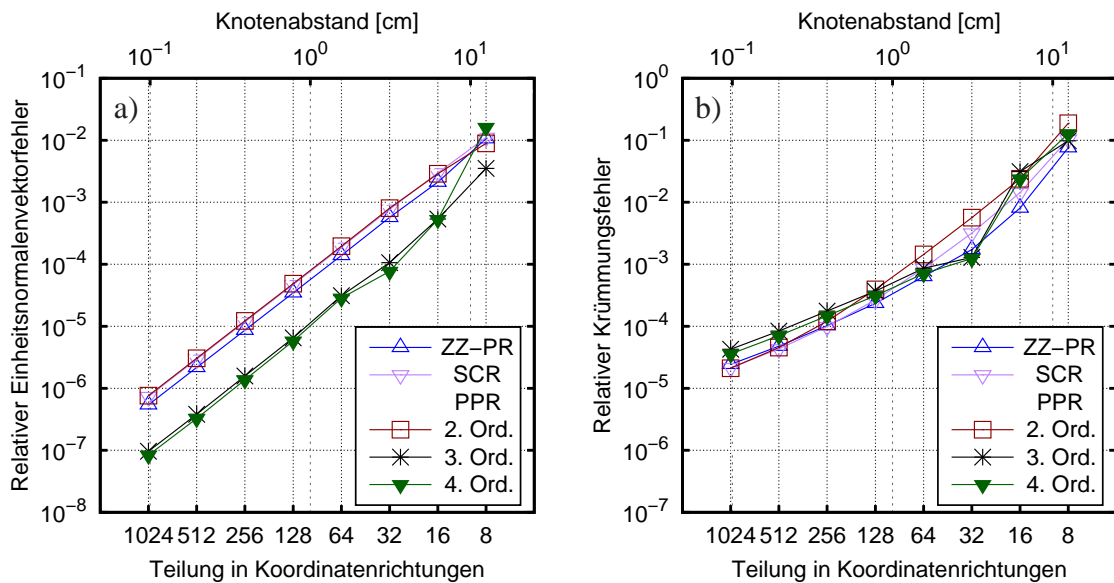


Bild 3.22: Abstandsnäherungen 2. Ordnung: a) Einheitsnormalenvektorfehler, b) Krümmungsfehler.

In Bild 3.22 a) konvergiert der Fehler der Einheitsnormalenvektorberechnung aller Verfahren quadratisch gegen Null, wobei PPR-Verfahren mit Ansätzen 3. und 4. Ordnung um ca. eine Größenordnung genauer sind. Die Ergebnisse der Krümmungsberechnungen in Bild 3.22 b) zeigen abflachende Kurven der Fehlerkonvergenz. Die anfänglich kubische Konvergenz auf groben Netzen verringert sich, so dass der Fehler auf sehr feinen Diskretisierungen lediglich noch mit 1. Ordnung gegen Null konvergiert. Die ZZ-PR-Technik weist hier die genauesten Ergebnisse auf. Damit sind Differenzennäherungen 2. Ordnung denen 1. Ordnung zur Berechnung von Krümmungswerten überlegen. Problematisch ist jedoch die Ermittlung von Ableitungswerten an den Knoten der Startlösung als Ausgangsinformation für die Abstandapproximation (3.38) der Fast-Marching-Methode. Die jeweiligen Ableitungen der Level-Set-Werte an den Knoten des Nahbereiches könnten zwar unter Verwendung von Wiederherstellungsverfahren berechnet werden, die Abstandapproximation in einem schmalen Band um die Grenzfläche ist dann jedoch nur noch iterativ möglich. Damit ist die Ausnutzung der Genauigkeitsvorteile von Einheitsnormalenvektor- und Krümmungsberechnungen mit Differenzennäherungen 2. Ordnung numerisch äußerst aufwändig, zumal iterative Abstandsberechnungen zur Ermittlung geometrischer Größen dann nach jedem Iterationsschritt zur Lösung der physikalischen Bestimmungsgleichungen einer Raum-Zeit-Scheibe durchzuführen sind. Da die Ermittlung von Grenzflächenkrümmungen im Rahmen dieser Arbeit eine untergeordnete Rolle spielt, sind entsprechende Berechnungen (Abschnitt 5.3) vereinfachend mit dem ZZ-PR-Verfahren und der Fast-Marching-Methode mit Differenzennäherungen 1. Ordnung durchgeführt. Der Genauigkeitsunterschied zu PPR-Verfahren mit Ansätzen 2. Ordnung ist nicht wesentlich, siehe Bild 3.21.

4. Unstetige Beschreibungsgrößen

Die Modellierung physikalischer Prozesse erfordert häufig die Beschreibung von Phänomenen, bei denen sich Feldgrößen auf sehr kleinen Längenskalen signifikant ändern. Diese Längenskalen sind oft mehrere Größenordnungen kleiner als die Längenskalen der zu beschreibenden Prozesse und können im Rahmen von Modellannahmen als infinitesimal klein angesehen werden. Der Verlauf der Feldgrößen ist damit unstetig. Beispiele sind u. a. die dynamische Interaktion verschiedener Materialien, strukturelle Versetzungen und Fehlstellen in Materialien, die Entstehung und das Wachstum von Rissen in Strukturen sowie Stoßwellen, Grenzschichten oder Flammen- und Reaktionsfronten. Neben Singularitäten sind starke und schwache Unstetigkeiten zu unterscheiden. Bei starken Unstetigkeiten weist der Verlauf betrachteter Feldgrößen Sprünge auf, während schwache Unstetigkeiten durch Knicke im Verlauf von Feldgrößen gekennzeichnet sind. Im Rahmen der hier zu beschreibenden oberflächengekoppelten Teilkontinua weisen die grenzflächenseitig unterschiedlichen Materialkenngrößen über Grenzflächen hinweg starke Unstetigkeiten auf. Das Geschwindigkeitsfeld hingegen ist schwach unstetig, da mit (2.41) die Stetigkeit gefordert ist, grenzflächenseitige Gradienten der Geschwindigkeit sich jedoch im Allgemeinen unterschiedlich einstellen. Der Spannungsverlauf über Grenzflächen hinweg kann mit (2.42) starke und schwache Unstetigkeiten aufweisen.

Die Finite-Element-Methode ist aufgrund ihrer Robustheit und Flexibilität das bevorzugte numerische Berechnungsverfahren in vielen Bereichen des Ingenieurwesens. Bei Aufgabenstellungen mit unstetigen Lösungscharakteristiken jedoch ist auch die Verwendung konventioneller FE-Methoden problembehaftet. Die exakte Abbildung unstetiger Lösungsverläufe ist lediglich entlang von Elementkanten möglich. Dies führt entweder zu Netzabhängigkeiten oder zur Notwendigkeit der ständigen Neuvernetzung des Berechnungsgebietes im Rahmen adaptiver Verfahren. Die Konvergenzeigenschaften dieser Verfahren bleiben jedoch herabgesetzt und zum Erreichen entsprechender Genauigkeiten sind teilweise unverhältnismäßig feine Diskretisierungen notwendig, siehe z. B. [68]. Als Alternative zu adaptiven Verfahren haben sich Verfahren mit zweckmäßigen Ansatzmodifikationen etabliert. Dabei werden die Ansatzräume ersetzt oder erweitert, so dass sie den speziellen Charakter der Lösungsausprägung erfassen und Neuvernetzungen unnötig sind. Für die in dieser Arbeit betrachteten bewegten Grenzflächen ist zur Erfassung unstetiger Lösungscharakteristika die erweiterte Finite-Element-Methode gewählt, da sie Level-Set-Methodik und Ansatzanreicherung in eleganter Weise vereint und so im Rahmen der Raum-Zeit-FEM Bewegungsbeschreibung und Ansatzweiterung konsistent erfasst.

Die Basis aller ansatzraumerweiternden Finite-Element-Methoden ist die Partition-of-Unity-FEM. Ihre Grundlagen sind in Abschnitt 4.1 des folgenden Kapitels vorgestellt. Die daraus abgeleitete und in dieser Arbeit verwendete erweiterte Finite-Element-Methode als lediglich lokal ansatzraumerweiterndes Verfahren steht im Fokus von Abschnitt 4.2. Darin wird die Konstruk-

tion jeweils angepasster Anreicherungsfunktionen für die auftretenden Lösungsunstetigkeiten gezeigt, wobei die Beibehaltung positiver Eigenschaften der FEM-Approximation und die Vermeidung konvergenzmindernder Terme im Übergang von konventioneller zu lokal erweiterter Approximation ausführlich diskutiert sind. Anschließend sind die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Anreicherungsfunktionen sowie die Vorschriften zur raumzeitlichen Ableitung erweiterter Ansätze angegeben. Im abschließenden Abschnitt 4.3 ist die numerische Integration unstetiger Ansätze diskutiert und die dafür notwendige algorithmische Umsetzung vorgestellt.

4.1 Partition-of-Unity Konzept

Definitionen. Betrachtet ist das räumliche Gebiet Ω_t zum Zeitpunkt t , das von n sich überlappenden Teilgebieten $\Omega_t^i, i = \{1, \dots, n\}$ bedeckt ist. Jedem dieser Teilgebiete ist eine mindestens C_0 -stetige Funktion $g_i = g(\Omega_t^i)$ zugeordnet, deren Einflussbereich sich auf Ω_t^i beschränkt. Die Menge aller so gebietsweit definierten Funktionen bildet eine Zerlegung der Eins bzw. Partition-of-Unity (PU), wenn sich ihre Summe an jedem Punkt $\mathbf{x} \in \Omega_t$ zu Eins ergibt,

$$\sum_{i=1}^n g_i(\mathbf{x}, t) = 1 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_t \quad . \quad (4.1)$$

Aufgrund der PU-Eigenschaft der summierten Funktionen g_i werden beliebige, in Ω_t definierte Näherungsfunktionen $f(\mathbf{x}, t)$ zur Approximation nichtpolynomialer Feldgrößen bei Multiplikation mit Gleichung (4.1) exakt reproduziert,

$$\sum_{i=1}^n g_i(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_t \quad . \quad (4.2)$$

Das angestrebte Näherungsverhalten der gewählten Funktionen $f(\mathbf{x}, t)$ bleibt damit erhalten.

Die konventionelle Raum-Zeit-Finite-Element-Basis (2.44) weist bei Linearkombination der darin enthaltenen Ansatzfunktionen die in (4.1) definierte PU-Eigenschaft auf. Genau diese Eigenschaft polynomialer Basisfunktionen finiter Elemente nutzen Melenk & Babuška [100] mit (4.2) gezielt aus, um die Näherungseigenschaften des Verfahrens im Rahmen der Partition-of-Unity-FEM (PUFEM) zu verbessern. Dabei erfolgt die Erfassung spezieller nichtpolynomialer Lösungscharakteristika mit erweiterten Ansätzen

$$u_{PU}^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i \in \mathcal{N}^{\text{std}}} N_i(\mathbf{x}, t) \left(\sum_{\alpha \in \mathcal{F}_i} \psi_\alpha(\mathbf{x}, t) \hat{a}_{\alpha i} \right) \quad (4.3)$$

zur Approximation einer beliebigen Feldgröße $u(\mathbf{x}, t)$. Darin ist \mathcal{F}_i die Menge der am jeweiligen Knoten i definierten und das spezielle Lösungscharakteristikum einbringenden Anreicherungsfunktionen $\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)$. Diese können nahezu beliebig gewählt werden und sind lediglich der Einschränkung unterworfen, dass im zu lösenden Gleichungssystem keine linearen Abhängigkeiten auftreten dürfen. Die Knotenfreiwerte $\hat{a}_{\alpha i}$ skalieren die jeweiligen Anteile der Ansatzfunktionen an der Gesamtlösung und sind die Bestimmungsvariablen des Verfahrens. Der Ansatzraum der konventionellen FE-Approximation bildet einen Unterraum der erweiterten Ansätze (4.3) und folgt für den speziellen Fall $\psi_1(\mathbf{x}, t) = 1; \psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 0, \forall \alpha \neq 1$. Die Diskretisierung und der grundsätzliche Lösungsalgorithmus bleiben von der Erweiterung der Ansätze unberührt. Die Anzahl der Freiwerte im Gleichungssystem steigt jedoch an.

4.2 Erweiterte Finite-Element-Methode

Sind unstetige Lösungseigenschaften lediglich in einem beschränkten Teil des Berechnungsgebietes präsent, dann ist es zweckmäßig, die erweiterten Ansätze (4.3) nur lokal an ausgewählten Netzknoten $\mathcal{N}^{\text{ext}} \subset \mathcal{N}^{\text{std}}$ in der Umgebung der speziellen Lösungsausprägung einzubringen. Der numerische Aufwand ist so wesentlich geringer als bei global erweiterten Ansatzräumen, da zusätzliche Freiheitsgrade nur dort eingeführt sind, wo mit Erweiterung der konventionellen Basis eine Steigerung der Approximationsgüte einhergeht. Die erweiterte FEM-Basis ist mit

$$\mathcal{V}_{\text{ext}} = \mathcal{V}_{\text{std}} \oplus \bigcup_{j \in \mathcal{N}^{\text{ext}}} N_j(\mathbf{x}, t) \left(\bigcup_{\alpha \in \mathcal{F}_j} \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (4.4)$$

eingeführt und vereinigt den global definierten konventionellen Ansatzraum (2.44) der Raum-Zeit-FEM mit den lediglich lokal eingebrachten Ansätzen der PUFEM. Die Ansätze dieser lokalen PUFEM, die als erweiterte (extended) Finite-Element-Methode (XFEM) in die Literatur eingegangen ist, besitzen für beliebige physikalischen Beschreibungsgrößen $u(\mathbf{x}, t)$ die Form

$$u_{\text{ext}}^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i \in \mathcal{N}^{\text{std}}} N_i(\mathbf{x}, t) \hat{u}_i + \sum_{j \in \mathcal{N}^{\text{ext}}} N_j(\mathbf{x}, t) \left(\sum_{\alpha \in \mathcal{F}_j} \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{a}_{\alpha j} \right) . \quad (4.5)$$

Die Wahl der Netzknoten $j \in \mathcal{N}^{\text{ext}}$ erfolgt in Abhängigkeit vom geometrischen Ort der unstetigen Lösungsausprägung und von der verwendeten Anreicherungsmethodik. Die Polynomgrade der konventionellen Ansätze $N_i(\mathbf{x}, t)$ und der anzureichernden Ansätze $N_j(\mathbf{x}, t)$ sind im Rahmen dieser Arbeit identisch gewählt, müssen jedoch nicht übereinstimmen, siehe z. B. [144].

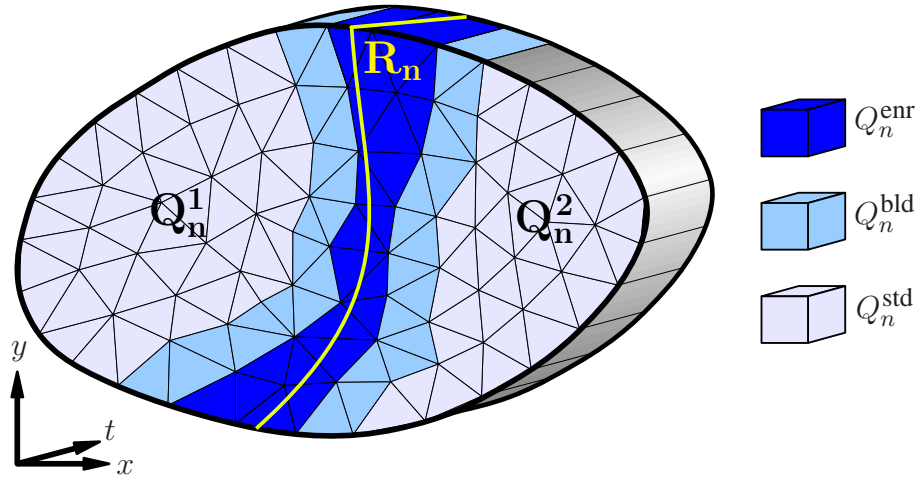


Bild 4.1: Elementteilgebiete der XFEM entsprechend den zu erweiternden Ansätzen in Elementen.

Bild 4.1 zeigt beispielhaft das diskretisierte Gebiet der Raum-Zeit-Scheibe $Q_n = \Omega_t \times I_n$ im Subintervall I_n , das sich aus den Teilgebieten Q_n^1 und Q_n^2 zusammensetzt. Die Grenzfläche $R_n = \Sigma_t \times I_n$ der Teilgebiete bildet den raumzeitlichen Ort der unstetigen Lösungsausprägung. Mit Kenntnis des Unstetigkeitsortes und gegebener Diskretisierung sind im Rahmen der XFEM reproduzierende, Blend- und Standardelemente zu unterscheiden.

Definitionen. Die geordnete Menge aller Elemente der Diskretisierung ist mit \mathcal{E} und die geordnete Menge aller Elementknoten eines Elementes $e \in \mathcal{E}$ mit $\mathcal{N}_{el,e}$ bezeichnet. Die von der Unstetigkeit geschnittenen Elemente heißen reproduzierende Elemente. Sie sind in der geordneten Elementmenge $\mathcal{E}^{\text{enr}} = \{e \in \mathcal{E} \mid e \cap R_n \neq \emptyset\}$ zusammengefasst und bilden das Subgebiet

$$Q_n^{\text{enr}} = \bigcup_{e \in \mathcal{E}^{\text{enr}}} Q_{n,e} \quad , \quad (4.6)$$

mit den jeweiligen Elementgebieten $Q_{n,e}$. Die geordnete Knotenmenge \mathcal{N}^{enr} der Elementknoten reproduzierender Elemente ist mit

$$\mathcal{N}^{\text{enr}} = \bigcup_{e \in \mathcal{E}^{\text{enr}}} \mathcal{N}_{el,e} \quad (4.7)$$

definiert. Zur Reproduktion unstetiger Lösungsausprägungen ist der Ansatzraum an allen Knoten reproduzierender Elemente mit (4.5) erweitert. Je nach gewählter Anreicherungsmethodik ist die Knotenmenge \mathcal{N}^{enr} gleich der Knotenmenge \mathcal{N}^{ext} oder eine Teilmenge davon, $\mathcal{N}^{\text{enr}} \subseteq \mathcal{N}^{\text{ext}}$. Die den reproduzierenden Elementen benachbarten Blendelemente sind in der geordneten Elementmenge $\mathcal{E}^{\text{bld}} = \{e \in \mathcal{E} \setminus \mathcal{E}^{\text{enr}} \mid \exists n \in \mathcal{N}_{el,e} : n \in \mathcal{N}^{\text{enr}}\}$ zusammengefasst und bilden den Übergang von lokal erweiterter zu konventioneller Approximation im Subgebiet

$$Q_n^{\text{bld}} = \bigcup_{e \in \mathcal{E}^{\text{bld}}} Q_{n,e} \quad . \quad (4.8)$$

Kennzeichnendes Merkmal von Blendelementen ist, dass die lediglich an den Knoten $j \in \mathcal{N}^{\text{enr}}$ definierten und an einem beliebigen Punkt \mathbf{x} in Q_n^{bld} ausgewerteten Ansatzfunktionen $N_j(\mathbf{x}, t)$ im Allgemeinen keine Partition-of-Unity bilden. Daher ist für den Fall $\mathcal{N}^{\text{ext}} = \mathcal{N}^{\text{enr}}$ die exakte Reproduktion von Anreicherungsfunktionen in Blendelementen nicht möglich. Dies kann u. a. bei der Approximation schwach unstetiger Beschreibungsgrößen zu störenden Termen höherer Ordnung führen, die das Lösungsverhalten des Verfahrens negativ beeinflussen. Vertiefend ist diese Problematik in Abschnitt 4.2.2 diskutiert. Neben \mathcal{N}^{enr} ist im Rahmen der korrigierten (corrected) XFEM ebenso die geordnete Knotenmenge $\mathcal{N}^{\text{corr}}$ von Bedeutung, die alle Elementknoten von reproduzierenden und Blendelementen umfasst. Mit der geordneten Elementmenge $\mathcal{E}^{\text{corr}} = \mathcal{E}^{\text{enr}} \cup \mathcal{E}^{\text{bld}}$ folgt die entsprechende Knotenmenge

$$\mathcal{N}^{\text{corr}} = \bigcup_{e \in \mathcal{E}^{\text{corr}}} \mathcal{N}_{el,e} \quad . \quad (4.9)$$

Die Elemente, die nicht $\mathcal{E}^{\text{corr}}$ angehören, bilden die Elementmenge $\mathcal{E}^{\text{std}} = \mathcal{E} \setminus \mathcal{E}^{\text{corr}}$ der Standardelemente. Das Subgebiet der Standardelemente folgt mit

$$Q_n^{\text{std}} = \bigcup_{e \in \mathcal{E}^{\text{std}}} Q_{n,e} \quad . \quad (4.10)$$

In Standardelementen sind die Ansätze nicht erweitert und Beschreibungsgrößen lediglich mit den konventionellen Basisansätzen (2.45) der FEM approximiert.

4.2.1 Konstruktion von Anreicherungsfunktionen

Die Wahl zweckmäßiger Anreicherungsfunktionen im Rahmen erweiterter Finite-Element-Methoden ist essentiell für die Näherungseigenschaften des Verfahrens und erfolgt in Abhängigkeit vom Ort und von der Ausprägung nichtpolynomialer Lösungscharakteristika. Im Mittelpunkt dieser Arbeit stehen die in Bild 4.2 skizzierten Kontaktunstetigkeiten an bewegten Grenzflächen. Die Nullniveaumenge einer Level-Set-Funktion approximiert den Unstetigkeitsort. Dort auftretende starke Unstetigkeiten in den Materialeigenschaften, spezielle Übergangsbedingungen und singuläre Grenzflächenquellterme führen auf die in Bild 4.2 a) und b) skizzierten Lösungsverläufe mit Sprüngen (C_0 -, C_0/C_1 -Unstetigkeiten) sowie die in Bild 4.2 c) dargestellten Lösungsverläufe mit Knicken (C_1 -Unstetigkeiten). Dabei definieren die zu beschreibenden Phänomene, in welcher Kombination Unstetigkeiten auftreten.

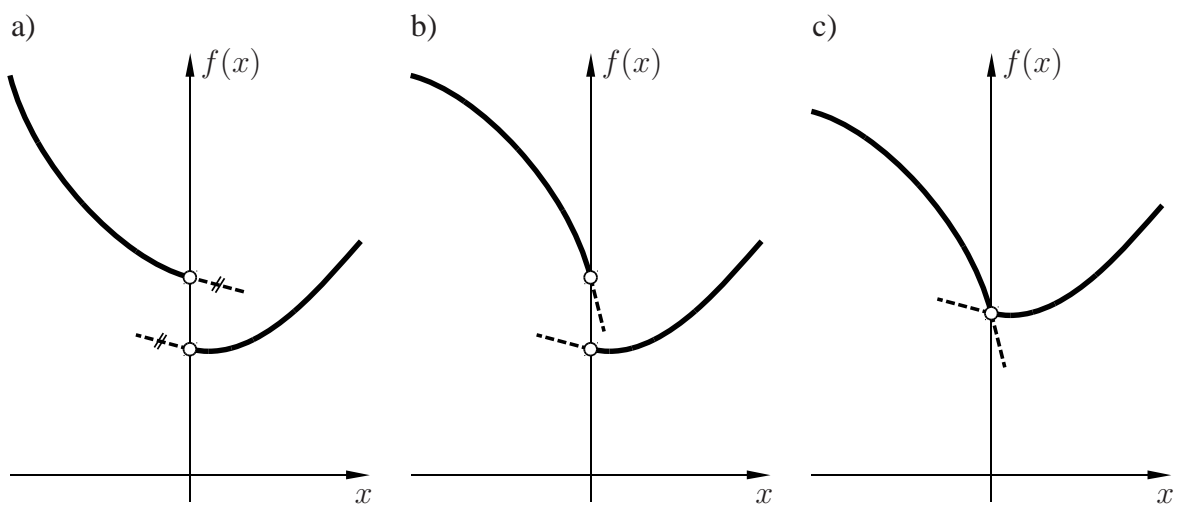


Bild 4.2: Unstetige Lösungsverläufe, a) C_0 -unstetig, b) C_0/C_1 -unstetig, c) C_1 -unstetig.

Zur Approximation stark unstetiger Lösungsausprägungen in Bild 4.2 a) und b) ist die Verwendung sprunghafter Anreicherungsfunktionen sinnvoll. Dolbow [39] und Moës et al. [106] z. B. setzen generalisierte Haarfunktionen ein, um das Verschiebungsfeld rissbehafteter Strukturen anzunähern. Belytschko et al. [17] verwenden Heaviside- und Stolarska et al. [146] Signumfunktionen zur Approximation von Sprüngen in der Verschiebungslösung. Zur Näherung schwach unstetiger Lösungsausprägungen bieten sich Betragsfunktionen an, die im Rahmen netzfreier Methoden erstmals von Krongauz & Belytschko [87] verwendet werden. Sukumar et al. [148] greifen diese Idee im Rahmen der XFEM zur Modellierung des Verschiebungsfeldes von Materialien mit beliebigen, ortsfesten Einschlüssen auf. Sie verwenden Level-Set-Funktionen sowohl zur Erfassung des geometrischen Ortes der Unstetigkeit als auch zur Konstruktion von Anreicherungsfunktionen. So sind lokale PUFEM und Level-Set-Methodik in eleganter Weise miteinander verknüpft, wodurch die Konstruktion unstetiger Anreicherungen wesentlich vereinfacht ist. Der hybride Ansatz, Anreicherungsfunktionen aus Level-Set-Lösungen zu konstruieren, bietet sich insbesondere bei der Erfassung bewegter Grenzflächen mit der Level-Set-Methodik an und ist im Rahmen dieser Arbeit ebenfalls umgesetzt. In Kombination mit der Raum-Zeit-FEM besteht darüber hinaus die Möglichkeit, zeitveränderliche Lösungsunstetigkeiten konsistent und mit hoher Genauigkeit auf topologisch unveränderten Raum-Zeit-Diskre-

tisierungen zu beschreiben. Folgende Ausführungen beziehen sich aus Gründen der Übersichtlichkeit auf den eindimensionalen Raum, gelten aber genauso für höherdimensionale Räume. Die mit der Level-Set-Lösung $\phi(x)$ konstruierten und im Rahmen dieser Arbeit zur Anreicherung eingesetzten Basisfunktionen zur Erfassung stark und schwach unstetiger Lösungsverläufe sind in Bild 4.3 a) und b) beispielhaft am 2-Knoten Stabelement dargestellt.

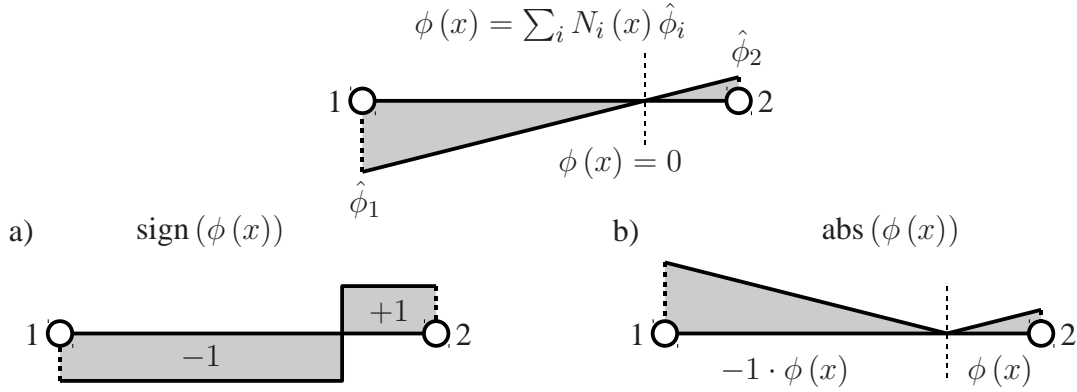


Bild 4.3: Konstruktion von Basisfunktionen zur Erfassung stark und schwach unstetiger Lösungsverläufe.

Hinsichtlich der erwarteten Lösungsunstetigkeiten wird die in Bild 4.3 a) skizzierte und mit Definition (3.8) gebildete Signumfunktion der Level-Set-Lösung

$$\psi^{C_0}(x) = \text{sign}(\phi(x)) \quad (4.11)$$

als Anreicherung sowohl zur Approximation stark als auch schwach unstetiger Lösungsverläufe eingesetzt. Der letztgenannte Modellierungsansatz erfüllt jedoch nicht unmittelbar die C_0 -Stetigkeit physikalischer Beschreibungsvariablen auf der Grenzfläche, so dass dort zusätzliche Zwangsbedingungen zu formulieren sind. Die in Bild 4.3 b) skizzierte Betragsfunktion

$$\psi^{C_1}(x) = \text{abs}(\phi(x)) = \text{sign}(\phi(x)) \cdot \phi(x) \quad (4.12)$$

der Level-Set-Lösung wird lediglich zur Modellierung C_1 -unstetiger Lösungsverläufe herangezogen. Bei direkter Anreicherung mit (4.11) und (4.12) ist die aufgabenspezifische Erfassung unstetiger Lösungscharakteristika zwar gewährleistet, die Kronecker- δ -Eigenschaft

$$N_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq j \\ 1 & \text{für } i = j \end{cases} \quad (4.13)$$

der konventionellen FEM-Approximation geht jedoch an allen Knoten k mit erweiterten Ansätzen verloren, da die Anreicherung dort Werte ungleich Null annimmt. Dadurch ist die Interpolation gesuchter physikalischer Größen erschwert, denn die Knotenfreiwerte \hat{u}_k der Standardansätze in (4.5) entsprechen nicht mehr dem Wert der Approximation $u_{\text{ext}}^h(x_k)$. Und damit ist auch die direkte Vorgabe eingepprägter Dirichlet-Randbedingungen an Randknoten nicht mehr möglich. Ein eleganter Ansatz, die genannten Schwierigkeiten zu umgehen, ist die von Belytschko et al. [17] vorgeschlagene Konstruktion versetzter (shifted) Anreicherungsfunktionen

$$\psi_k^{C_0, \text{shift}}(x) = \text{sign}(\phi(x)) - \text{sign}(\phi(x_k)) \quad (4.14)$$

$$\psi_k^{C_1, \text{shift}}(x) = \text{abs}(\phi(x)) - \text{abs}(\phi(x_k)) \quad (4.15)$$

mit denen die Basisfunktionen (4.11) und (4.12) jeweils knotenweise versetzt formuliert sind. Die Werte der versetzten Anreicherungsfunktionen (4.14) und (4.15) nehmen am Knoten k den Wert Null an, wobei die positiven Eigenschaften der ursprünglichen Anreicherung erhalten bleiben. Bild 4.4 zeigt beispielhaft die versetzten Anreicherungsfunktionen (4.14) und (4.15) für die Knoten $k = 1$ und $k = 2$ des 2-Knoten Stabelementes aus Bild 4.3.

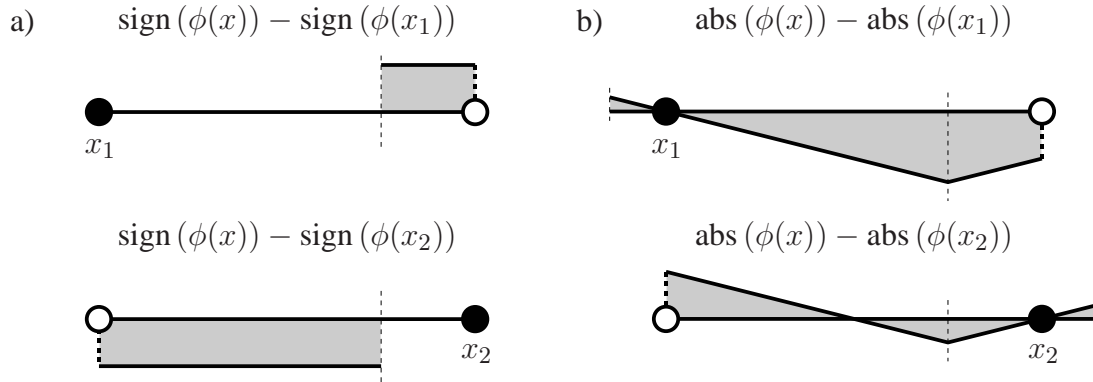


Bild 4.4: Knotenweise versetzte Basisfunktionen zur Erfassung starker und schwacher Unstetigkeiten.

Die versetzte Signumfunktion in Bild 4.4 a) wirkt lediglich in reproduzierenden Elementen und nimmt in den übrigen Elementen des Berechnungsgebietes den Wert Null an. Sowohl für die Betragsfunktion (4.12) als auch für die versetzte Betragsfunktion (4.15) jedoch wirken die entsprechenden Anreicherungsfunktionen auch in Blendelementen, wie in Bild 4.4 b) angedeutet. Aufgrund der dort fehlenden Partition-of-Unity Eigenschaft der angereicherten Ansätze können störende Terme höherer Ordnung verbleiben, die die Qualität der Lösung und das Konvergenzverhalten des Verfahrens negativ beeinträchtigen bzw. die Konvergenz sogar ganz verhindern. Vertiefend ist diese Problematik im folgenden Abschnitt diskutiert.

4.2.2 Blendelemente

Bei den lediglich lokal erweiterten Ansätzen der XFEM können störende Terme auftreten, wenn Anreicherungsfunktionen gewählt sind, die abseits des Unstetigkeitsortes nicht konstant sind und in Blendelementen nicht verschwinden. Das Auftreten dieser Terme gründet in der Multiplikation der Anreicherungsfunktionen mit den anzureichernden Ansätzen, die die Partition-of-Unity Eigenschaft für den Fall $\mathcal{N}^{\text{ext}} = \mathcal{N}^{\text{enr}}$ lediglich in reproduzierenden Elementen aufweisen, nicht jedoch im Übergang von konventioneller zu erweiterter Approximation. Damit verbleiben ungewollte (parasitäre) Terme höherer Ordnung in Blendelementen, deren Ursprung in unvollständig reproduzierten Anreicherungsfunktionen begründet ist und die von den konventionellen FEM-Basisansätzen „ausgeglichen“ werden müssen. Sind jedoch konventionelle und anzureichernde Ansätze identisch gewählt, dann spannen die Standardbasisfunktionen den Ansatzraum der parasitären Terme nicht auf und entsprechend ist ein Ausgleich nicht möglich. Die ungewollten Terme können so den Fehler der Approximation dominieren und die Konvergenzordnung des Verfahrens mindern bzw. Konvergenz sogar verhindern [30, 105]. Verschiedene der in der Literatur vorgeschlagenen Strategien zur Lösung dieses Problems sind nachfolgend kurz erläutert.

Um parasitäre Terme in Blendelementen ausgleichen zu können, besteht die Möglichkeit der Anpassung der Polynomordnung verwendeter Ansatzfunktionen, wie z. B. Legay et al. [91] im Rahmen spektraler finiter Elemente zeigen. Dabei treten jedoch im Allgemeinen Kombinationen von Ansatzordnungen auf, die hinsichtlich der Effizienz des numerischen Verfahrens nicht optimal sind. Des Weiteren stößt dieses Vorgehen an Grenzen, wenn Anreicherungen aus nicht-polynomialen Funktionen gebildet sind, wie z. B. bei den von Belytschko & Black in [14] vorgestellten trigonometrischen Rissspitzenanreicherungsfunktionen zur Berechnung fortschreitenden Risswachstums. Ähnlich beschränkt auf polynomiale Anreicherungen ist das von Chessa et al. [30] vorgestellte Verfahren mit hierarchischen Blendelementen. Dabei wird der Polynomgrad der konventionellen Ansätze mit lediglich auf den Kanten benachbarter Blendelemente hinzugefügten neuen Knoten erhöht, wodurch numerisch optimale Kombinationen von Ansatzordnungen möglich sind. Negative Effekte parasitärer Terme sind so eliminiert bzw. vermindert. Ebenfalls in [30] ist ein Ansatz vorgestellt, der auf der Methodik der angenommenen Verzerrungen (assumed strain formulation) basiert. Dabei ist das Verzerrungsfeld in Blendelementen im Rahmen einer Hu-Washizu-Formulierung dahingehend modifiziert, dass unerwünschte Anteile der Approximation eliminiert sind. Das Verfahren ist zwar nicht limitiert hinsichtlich der zu wählenden Anreicherungsfunktionen, die Wahl der Verzerrungsansätze ist jedoch nicht trivial, denn diese sind bezüglich der verwendeten Elemente zu formulieren, müssen linear unabhängig sein, den Ansatzraum der parasitären Terme aufspannen und jede aufgabenspezifisch formulierte Anreicherungsmöglichkeit abdecken. Gracie et al. [56] z. B. verwenden Dreieckselemente mit 16 Verzerrungsansätzen zur Eliminierung störender Terme bei der Simulation elastischen Risswachstums mit den in [106] vorgestellten Anreicherungsfunktionen. Ein weiteres Verfahren mit gänzlicher Vermeidung von Blendelementen ist in [56] vorgestellt. Dabei ist das Berechnungsgebiet entsprechend der auftretenden Singularitäten und Unstetigkeiten in separate Subgebiete (Patches) mit reproduzierenden und Standardelementen unterteilt. Kontinuierliche Lösungsverläufe zwischen den Patches sind dann im Rahmen eines diskontinuierlichen Galerkin-Verfahrens in schwacher Form erzwungen.

Mit der korrigierten XFEM stellt Fries in [49] ein Verfahren vor, mit dem parasitäre Terme in Blendelementen in eleganter Weise behandelt werden. Dabei ist $\mathcal{N}^{\text{ext}} = \mathcal{N}^{\text{corr}}$ gewählt, so dass anzureichernde Ansatzfunktionen auch in Blendelementen Partition-of-Unity Eigenschaften aufweisen. Zusätzlich dazu ist eine stetige Übergangsfunktion definiert, die in reproduzierenden Elementen konstant den Wert Eins annimmt und in Blendelementen linear von Eins auf Null abfällt. Nach Multiplikation mit der Übergangsfunktion sind die verwendeten versetzten Anreicherungsfunktionen in reproduzierenden Elementen exakt reproduziert und werden in Blendelementen ausgeblendet. Parasitäre Terme sind bei diesem Verfahren direkt von den angereicherten Ansätzen in Blendelementen ausgeglichen. Bezüglich der Wahl der Anreicherungsfunktionen ist die korrigierte XFEM allgemein anwendbar und nicht beschränkt. Anzumerken ist, dass die korrigierte XFEM einen Sonderfall der PUFEM-basierten XFEM [137] darstellt. Die grundlegende Idee dieser Methodik ist von Laborde et al. bereits in [89] formuliert. Ein lediglich auf die Abbildung unstetiger Lösungsgradienten begrenzter Ansatz ist die von Moës et al. in [105] vorgestellte Ridge-Anreicherung. Diese ist mit der Betragsfunktion (4.12) und einer modifizierten Betragsfunktion der Level-Set-Lösung so konstruiert, dass sie ausschließlich in reproduzierenden Elementen ungleich Null ist. In Blend- und Standardelementen verschwindet die Anreicherung, wodurch keine parasitären Terme auftreten.

Alternativ zu den oben aufgeführten Verfahren bietet sich zur Approximation schwach unstetiger Lösungsverläufe auch die Verwendung abschnittsweise konstanter Anreicherungsfunktionen an. Damit entstehen keine parasitären Terme in Blendelementen, die Beschreibungsvariablen beidseitig der Grenzfläche sind jedoch formal entkoppelt und erfüllen nicht die dort aufgabenspezifisch formulierten Übergangsbedingungen. Entsprechend ist die Kopplung von Feldgrößen mit zusätzlich auf Grenzflächen formulierten Übergangsbedingungen zu erzwingen. Dafür eignen sich beispielsweise Lagrange-Multiplikatoren, die im Rahmen der XFEM erstmals von Merle & Dolbow [102] mit einer dem Augmented-Lagrange-Verfahren [138] ähnlichen Methode zur Berechnung bewegter Phasengrenzflächen bei Phasenumwandlungsprozessen eingesetzt sind. Ebenso möglich ist die explizite Formulierung von Lagrange-Multiplikatoren als zusätzliche Bestimmungsvariablen auf Grenzflächen. Dieser Ansatz führt jedoch auf ein gemischtes Verfahren, bei dem die Abstimmung der zur Approximation verwendeten Ansatzordnungen gemäß der Babuška-Brezzi-Bedingung [10, 20] nicht trivial ist [80, 104]. Darüber hinaus sind explizite Lagrange-Multiplikatoren bei bewegten Grenzflächen stetig an die zugrundeliegende Diskretisierung anzupassen, was bei lokal verdichteten Netzen sehr aufwändig ist. Im Rahmen der von Kölke [85] sowie Zilian & Legay [168] vorgestellten Kopplungsmethodik ist die Formulierung expliziter Lagrange'scher Multiplikatoren vermieden. Stattdessen werden auf die Knoten der Menge \mathcal{N}^{enf} verteilte, implizite und aufgabenspezifisch grenzflächenunstetige Lagrange-Multiplikatoren formuliert, deren Verwendung in oszillationsfreien numerischen Lösungen resultiert. Das Einbringen neuer Freiwerte ist jedoch, wie bei nahezu allen auf Lagrange-Multiplikatoren gründenden Methoden, als nachteilig zu bewerten.

Im Unterschied dazu werden bei Penalty-Verfahren [11] keine neuen Freiwerte eingeführt. Die Methodik ist jedoch nicht konsistent, weist keine optimale Konvergenzordnung auf und erfordert einen heuristisch zu wählenden Penalty-Faktor, der die Kondition der Systemmatrix beeinträchtigen kann. Ein alternativer Ansatz, ebenfalls ohne zusätzliche Freiwerte, ist Nitsche's Methode [113], die als konsistentes Penalty-Verfahren angesehen werden kann und eng verwandt ist mit stabilisierten Lagrange-Multiplikator-Formulierungen [145]. Die Anwendung des Verfahrens auf unstetige Lösungsverläufe im Rahmen von Aufgabenstellungen mit elliptischem Differentialoperator sowie der Strukturmechanik zeigen Hansbo & Hansbo in [60, 61]. Die Methodik basiert auf verschiedenen natürlichen (aus partieller Integration) und künstlich eingeführten konsistenten Grenzflächentermen, inklusive eines Penalty-Terms zur Stabilisierung des Gleichungssystems. Der darin verwendete Penalty-Faktor ist im Sinne einer Galerkin/Least-Squares-Stabilisierung auch als Stabilisierungsfaktor interpretierbar und in Abhängigkeit vom Netz und den grenzflächenseitigen Materialien zu wählen. Bislang ist die Anzahl der veröffentlichten Beiträge zur Formulierung allgemeingültiger Ausdrücke für diese Faktoren jedoch gering, siehe z. B. [37, 38, 43]. Einen weiteren Ansatz zur Kopplung von Feldgrößen auf Grenzflächen präsentieren Zilian & Fries [167] mit einer lediglich örtlich in reproduzierenden Elementen eingebrachten gemischt-hybriden Formulierung (localized mixed-hybrid method). Darin dienen zusätzliche Spannungsfreiwerte als Lagrange-Multiplikatoren zur Erzwingung von Übergangsbedingungen. Nach Ablösen der Spannungen auf Elementebene verbleiben keine zusätzlichen Freiwerte im Gleichungssystem. Die Anwendung der Methodik auf unstetige Lösungsverläufe im Rahmen von Aufgabenstellungen mit elliptischem Differentialoperator und der linearen Elastizität [167] zeigen, dass bei ruhenden Grenzflächen keine weiteren Stabilisierungsterme notwendig sind.

4.2.3 Wahl der Anreicherungsfunktionen

Im Rahmen dieser Arbeit sind sowohl Grenzflächen zwischen mehreren inkompressiblen Fluiden, als auch Grenzflächen zwischen inkompressiblen Fluiden und kompressiblen Strukturmaterialien betrachtet. Dabei treten einerseits Beschreibungsvariablen auf, die beidseitig einer Grenzfläche vorliegen, andererseits aber auch Beschreibungsgrößen auf lediglich einer Grenzflächenseite. Entsprechend erfolgt die Approximation je nach betrachteter Beschreibungsvariable mit erweiterten oder mit ersetzenden Ansatzfunktionen.

Bei beidseitig einer Grenzfläche vorliegenden Beschreibungsvariablen sind die erweiterten Ansätze zur Erfassung stark und schwach unstetiger Lösungsverläufe mit der von Kölke [85] zur Abbildung von Sprüngen vorgestellten und knotenweise definierten Signumanreicherung

$$\psi_k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} (1 - \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t)) \cdot \text{sign}(\phi(\mathbf{x}_k, t_k))) \quad (4.16)$$

gebildet. Bild 4.5 zeigt beispielhaft die mit (4.16) konstruierten Anreicherungsfunktionen sowie die angereicherten Ansätze für die Knoten $k = 1$ und $k = 2$ des 2-Knoten Stabelementes.

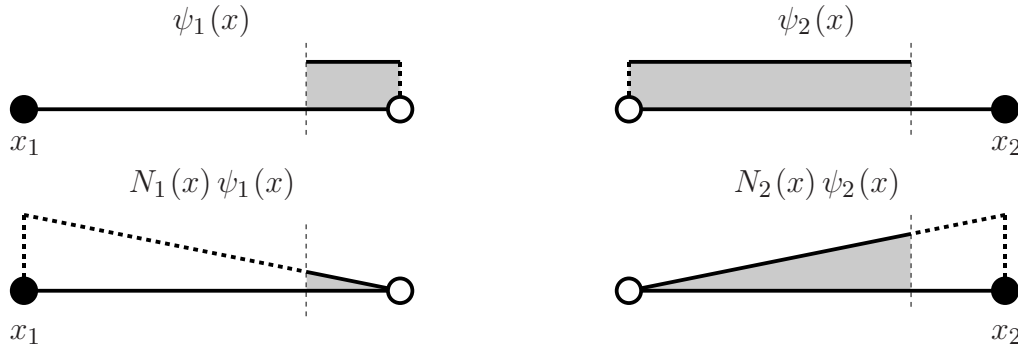


Bild 4.5: Signumanreicherung sowie angereicherte Ansätze am 2-Knoten-Stabelement.

Mit (4.16) sind die Beschreibungsvariablen beidseitig einer Grenzfläche jedoch formal entkoppelt und die Grenzflächenstetigkeit schwach unstetiger Lösungen ist zu erzwingen. Dafür wird im Rahmen dieser Arbeit zur Modellierung von Mehrfluidströmungen hauptsächlich Nitsche's Methode [113] verwendet. Die Kopplung von Fluid- und Strukturmaterialien hingegen ist mit der örtlich in reproduzierenden Elementen eingebrachten gemischt-hybriden Formulierung nach Zilian & Fries [167] umgesetzt. Beide Verfahren kommen im Gegensatz zu Lagrange-Multiplikator-Formulierungen ohne zusätzlich eingeführte Freiwerte zur Kopplung von Beschreibungsgrößen aus. Negativ zu bewerten ist jedoch der heuristisch zu wählende Penalty-Faktor. Die Grundzüge der Verfahren sind in den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 dargestellt.

Bei Beschreibungsgrößen, die lediglich auf einer Grenzflächenseite vorliegen, sind die ersetzenden Ansätze mit gebietsseitig definierten Heavisideanreicherungen gebildet. Dabei erfolgt die Konstruktion der Anreicherungen wieder mit der Signumfunktion der Level-Set-Lösung,

$$\psi_{\Omega_t^i}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} (1 + \text{sign}(\phi(\mathbf{x}, t)) \cdot \text{sign}(\phi(\mathbf{x}_{\Omega_t^i}, t))) \quad (4.17)$$

Zur Unterscheidung sind die Punkte \mathbf{x} des Teilgebietes Ω_t^i zum Zeitpunkt t darin mit $\mathbf{x}_{\Omega_t^i}$ bezeichnet. Bild 4.6 zeigt beispielhaft die mit (4.17) gebildete Anreicherungsfunktion sowie die angereicherten Ansätze für die Knoten $k = 1$ und $k = 2$ des in zwei unterschiedliche Teilgebiete Ω_t^1 und Ω_t^2 unterteilten 2-Knoten Stabelementes.

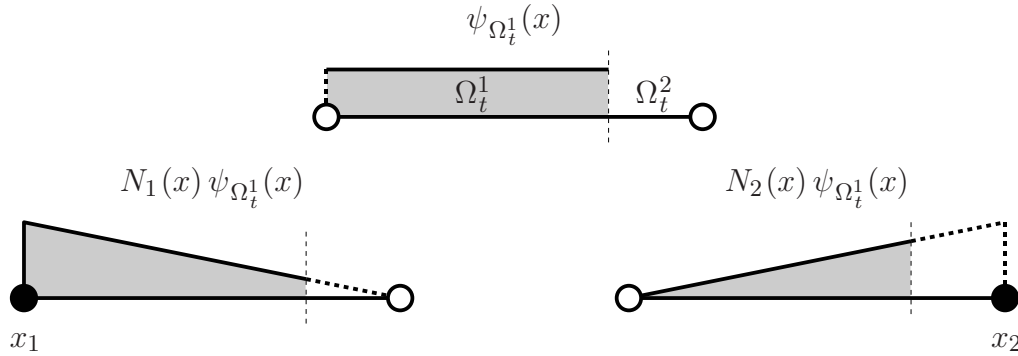


Bild 4.6: Heavisideanreicherung sowie angereicherte Ansätze am 2-Knoten-Stabelement.

Die mit (4.17) angereicherten Ansätze sind lediglich in reproduzierenden Elementen eingesetzt und ersetzen dort die konventionellen Ansatzfunktionen. Somit sind einseitig der Grenzfläche auftretende Beschreibungsgrößen in reproduzierenden Elementen lediglich mit angereicherten Ansätzen und in den dazu benachbarten Blendelementen mit konventionellen Ansätzen erfasst. Die mit (4.17) gebildeten ersetzenden Ansatzfunktionen sind ein Sonderfall erweiterter Ansätze, bei denen die konventionellen Ansätze mit $\psi(\mathbf{x}, t) = 0$ anstatt $\psi(\mathbf{x}, t) = 1$ angereichert sind. Parasitäre Terme in Blendelementen treten mit den Ansätzen (4.17) nicht auf.

Ergänzend zu den in dieser Arbeit verwendeten Methoden zur Modellierung schwach unstetiger Lösungsverläufe mit sprungbehafteten Ansätzen sind in Abschnitt 5.4 ebenfalls Betragsanreicherungen mit Ridge-Funktionen [105] und im Rahmen der korrigierten XFEM [49] vergleichend untersucht. Für das vertiefte Studium beider Methoden sei auf die angegebenen Literaturstellen verwiesen. Der Vollständigkeit halber sind hier jedoch die jeweiligen Anreicherungsfunktionen der verwendeten Betragsanreicherungen angegeben.

Ridge-Anreicherung. Die Ridge-Anreicherung ist mit zwei unterschiedlich definierten Betragsfunktionen der Level-Set-Lösung konstruiert,

$$\psi^R(\mathbf{x}, t) = \text{mod abs}(\phi(\mathbf{x}, t)) - \text{abs}(\phi(\mathbf{x}, t)) \quad . \quad (4.18)$$

Darin ist eine modifizierte Betragsfunktion

$$\text{mod abs}(\phi(\mathbf{x}, t)) = \sum_{i \in \mathcal{N}^{\text{std}}} N_i(\mathbf{x}, t) \text{abs}(\hat{\phi}_i) \quad (4.19)$$

verwendet, bei der lediglich die Beträge der knotenweise vorliegenden Level-Set-Freiwerte berücksichtigt sind. Damit unterscheidet sich die modifizierte Betragsfunktion (4.19) nur in reproduzierenden Elementen von der mit (4.12) gegebenen regulären Betragsfunktion der Level-Set-Lösung. Die Differenz (4.18) beider Funktionen ist lediglich in den offenen Elementgebieten reproduzierender Elemente ungleich Null und verschwindet an allen Elementknoten sowie in den übrigen Elementen des Berechnungsgebietes. Entsprechend treten keine parasitären Terme

in Blendelementen auf und auch die Kronecker- δ -Eigenschaft (4.13) der konventionellen FEM-Approximation bleibt erhalten.

Korrigierte XFEM. Im Rahmen der korrigierten XFEM sind die Ansatzfunktionen im Gegensatz zur konventionellen XFEM an allen Knoten von reproduzierenden und Blendelementen erweitert, $\mathcal{N}^{\text{ext}} = \mathcal{N}^{\text{corr}}$. Zusätzlich ist eine stetige Funktion

$$R(\mathbf{x}, t) = \sum_{i \in \mathcal{N}^{\text{enr}}} N_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.20)$$

definiert, die in reproduzierenden Elementen eine Partition-of-Unity und in Blendelementen eine Rampenfunktion ausbildet und so die Anreicherung im Übergang von konventioneller zu erweiterter Approximation ein- bzw. ausblendet. Die knotenspezifische Anreicherung an allen Knoten $k \in \mathcal{N}^{\text{corr}}$ mit der versetzten Betragsfunktion (4.15) und der Funktion (4.20) ist mit

$$\psi_k^C(\mathbf{x}, t) = (\text{abs}(\phi(\mathbf{x}, t)) - \text{abs}(\phi(\mathbf{x}_k, t_k))) \cdot R(\mathbf{x}, t) \quad (4.21)$$

gegeben. Die erweiterten Ansätze der korrigierten XFEM besitzen auch in Blendelementen die Partition-of-Unity Eigenschaft, wodurch parasitäre Terme nach Aufstellen des Gleichungssystems ausgeglichen sind und somit keine störenden Terme höherer Ordnung mehr auftreten [49].

Ableitungen. Zur Approximation bewegter Kontaktunstetigkeiten einer Beschreibungsvariablen $u(\mathbf{x}, t)$ ist beispielhaft der erweiterte Raum-Zeit Ansatz

$$u_{\text{ext}}^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{i \in \mathcal{N}^{\text{std}}} N_i(\mathbf{x}, t) \hat{u}_i + \sum_{j \in \mathcal{N}^{\text{ext}}} N_j(\mathbf{x}, t) \psi_j(\mathbf{x}, t) \hat{a}_j \quad (4.22)$$

betrachtet. Dieser setzt sich aus der an allen Knoten $i \in \mathcal{N}^{\text{std}}$ der Diskretisierung definierten konventionellen FE-Approximation und der lokal an den Knoten $j \in \mathcal{N}^{\text{ext}}$ mit den knotenweise definierten Funktion $\psi_j(\mathbf{x}, t)$ angereicherten FE-Approximation zusammen. Die Knotenmenge \mathcal{N}^{ext} entspricht im Allgemeinen der Knotenmenge \mathcal{N}^{enr} . Die Koeffizienten \hat{u}_i der konventionellen und \hat{a}_j der angereicherten Ansätze sind die Freiwerte der Approximation. In den Modellgleichungen treten räumliche und zeitliche Ableitungen der Beschreibungsvariablen auf. Die ersten Ableitungen der erweiterten Ansätze (4.22) nach den globalen Raum-Zeit Koordinaten $(*) = \{x, y, z, t\}$ folgen unter Anwendung der Kettenregel,

$$\frac{\partial u_{\text{ext}}^h}{\partial (*)} = \sum_{i \in \mathcal{N}^{\text{std}}} \frac{\partial N_i}{\partial (*)} \hat{u}_i + \sum_{j \in \mathcal{N}^{\text{ext}}} \left(\frac{\partial N_j}{\partial (*)} \psi_j + N_j \frac{\partial \psi_j}{\partial (*)} \right) \hat{a}_j \quad , \quad (4.23)$$

und sind mit Ausnahme des geometrischen Ortes der Kontaktunstetigkeit an jedem Punkt grenzflächenbeherbergender Elemente definiert. Bei Anreicherung mit abschnittsweise konstanten Funktionen vereinfacht sich (4.23) dahingehend, dass die Terme mit abgeleiteten Anreicherungs-funktionen entfallen. Die oben definierten ersetzenden Ansatzfunktionen stellen einen Sonderfall erweiterter Ansätze dar, wodurch auch deren Ableitungen in (4.23) enthalten sind.

4.3 Numerische Integration unstetiger Ansätze

Mit der zeitlichen Unveränderlichkeit der verwendeten Raum-Zeit-Diskretisierungen schneiden die mit dem Geschwindigkeitsfeld durch das Gebiet transportierten Grenzflächen im Allgemeinen verschiedene Elemente des Berechnungsgebietes. Die dort eingebrachten unstetigen Ansatzfunktionen der XFEM verursachen unstetige Integranden, die entsprechend angepasste Algorithmen zur exakten numerischen Integration erfordern. Dafür wird das Raum-Zeit-Gebiet $Q_{n,e}$ eines im Subintervall I_n von Grenzflächen geschnittenen und mit m verschiedenen Materialien $i = \{1, \dots, m\}$ belegten Elementes in die den Materialien zugeordneten Teilgebiete $Q_{n,e}^i$, $Q_{n,e} = \sum_{i=1}^m Q_{n,e}^i$, zerlegt. Die Integration einer grenzflächenunstetigen Funktion $f(\mathbf{x}, t)$ erfolgt dann als Summe von Teilintegralen über die Elementteilgebiete,

$$\int_{Q_{n,e}} f(\mathbf{x}, t) dQ = \sum_{i=1}^m \int_{Q_{n,e}^i} f(\mathbf{x}, t) dQ \quad . \quad (4.24)$$

In der algorithmischen Umsetzung ist das Raum-Zeit-Prismenelement hierfür zunächst regulär in Tetraederelemente (Simplexe) unterteilt, wie in Bild 4.7 skizziert. Ausgehend von dieser Zerlegung erfolgt die weitere Unterteilung der Tetraederelemente anhand der von den Nullstellen der Level-Set-Funktion auf den Tetraederseiten aufgespannten Grenzfläche in Subtetraeder, innerhalb derer die elementunstetige Funktion $f(\mathbf{x}, t)$ Stetigkeit aufweist. Wenn mehrere Grenzflächen im Element existieren, wird die Prozedur sukzessive für jede Grenzfläche durchgeführt, bis der Integrand der schwachen Form in jedem Subtetraeder stetig ist. Die Integration grenzflächenunstetiger Funktionen über das Elementgebiet erfolgt dann mit Anwendung des Gauß'schen Quadraturverfahrens auf alle Subtetraeder. Unter Voraussetzung gebietsweise polynomialer Funktionsverläufe ist diese Integration exakt durchführbar.

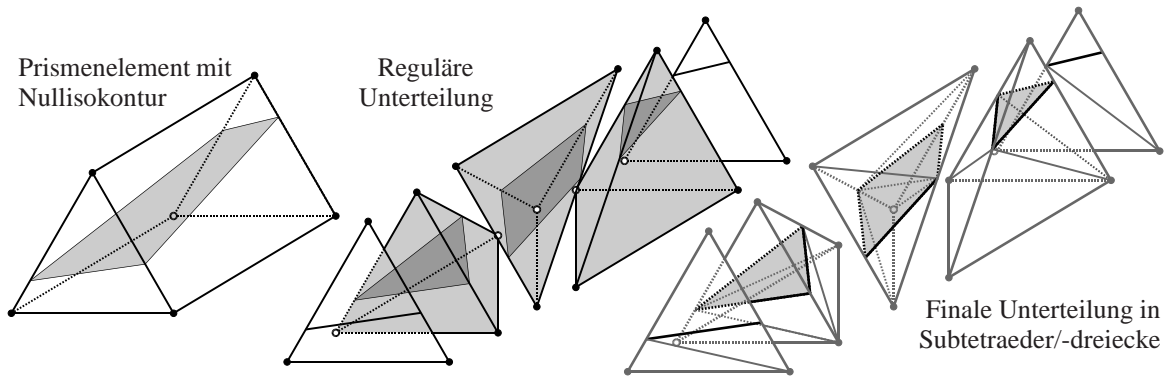


Bild 4.7: Unterteilung eines Raum-Zeit-Elementes anhand einer Grenzfläche im Element.

Für die Integration über Zeitscheibengrenzen und Grenzflächen sind ähnliche Algorithmen eingesetzt. Zeitscheibenanfang und -ende benachbarter Raum-Zeit-Elemente werden zur Integration anhand der im räumlichen Gebiet linear interpolierten Grenzflächen in Subdreiecke unterteilt. Grenzflächen innerhalb der verwendeten Raum-Zeit-Elemente sind aufgrund der Ansätze in Zeitrichtung im Allgemeinen gekrümmt. Vereinfachend ist die Nullisokontur der Level-Set-Funktion im Element jedoch mit planaren Subdreiecken approximiert, siehe Bild 4.7. Die Auswertung von Integralen über Zeitscheibengrenzen und Grenzflächen erfolgt wieder mit Gauß'scher Quadratur über die jeweils ermittelten Subdreiecke.

5. Zwei-Fluid-Strömungen

Die Bandbreite der in Natur und Technik auftretenden Zwei-Fluid-Strömungen ist groß und umfasst im Allgemeinen die Erscheinungsformen Wellen, Blasen, Tropfen, Strahlen und Filme. Während Wellenformen und -geschwindigkeiten zur Auslegung und Formoptimierung von Konstruktionen des Küsteningenieurwesens und des Schiffbaus von Bedeutung sind, hat die Tropfengröße z. B. bei Zerstäubungs- und Verdampfungsprozessen von Kraftstoffen Einfluss auf die Effektivität von Verbrennungsmotoren. In der chemischen Industrie werden Blasen gezielt zu chemischen und biochemischen Reaktionen in Blasensäulenreaktoren herangezogen. Strahlen haben z. B. Einfluss bei Formgebungsprozessen flüssiger Metalle in der metallverarbeitenden Industrie, während Flüssigkeitsfilme bei Beschichtungs- und Trocknungsprozessen zur Herstellung von Polymeren und Papieren von Bedeutung sind. Das Verständnis der dabei auftretenden Phänomene erfordert die Modellierung der Strömungsvorgänge als Zwei-Fluid-Strömung, da experimentelle Beobachtungen bei Vernachlässigung der Dynamik einer zweiten Fluidphase entweder nur unvollständig oder gar nicht erfasst sind. Zudem treten technisch relevante Zwei-Fluid-Strömungen teilweise auf Längen- und Zeitskalen auf, die experimentell nur mit großem Aufwand erforscht werden können oder für Experimente gar nicht zugänglich sind.

Im folgenden Kapitel steht die Validierung des verwendeten numerischen Verfahrens anhand verschiedener Modellsituationen von Zwei-Fluid-Strömungen mit unstetigen Lösungsverläufen im Vordergrund. Dafür sind einige relevante strömungscharakterisierende Kennzahlen in Abschnitt 5.1 vorgestellt und erläutert. Ausgangspunkt der numerischen Berechnungen ist die zu diskretisierende schwache Form der Modellgleichungen. Sie ist in Abschnitt 5.2 angegeben, wobei verschiedene Möglichkeiten der Formulierung von Materialgleichungen diskutiert sind und deren Einbindung in die schwache Form in Abhängigkeit vom verwendeten Kopplungsverfahren gezeigt ist. Weiterhin ist die schwache Form zur Erfassung von Oberflächenspannungsphänomenen mit Laplace-Beltrami-Operatoren auf Grenzflächen hergeleitet. Als Abschluss von Abschnitt 5.2 ist die Lösungsstrategie zur Berechnung des gekoppelten Gesamtsystems oberflächengekoppelter Zwei-Fluid-Systeme erläutert. Die Validierung sprungbehafteter Druckansätze erfolgt in Abschnitt 5.3 am Beispiel einer stehenden Kapillarwelle. Das Beispiel entstammt der Fachliteratur, wodurch der Vergleich verschiedener Methoden zum Einbringen von Oberflächenspannungen mit den in der Literatur angegebenen Ergebnissen möglich ist. In Abschnitt 5.4 sind Konvergenz und Genauigkeit des Verfahrens hinsichtlich schwach unstetiger Geschwindigkeitsverläufe mit den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten, diskret Kopplungsbedingungen einbringenden Verfahren anhand einer Schichtenströmung untersucht. Den Abschluss des Kapitels bildet Abschnitt 5.5, in dem Berechnungen mit erweiterten Ansätzen für alle Beschreibungsvariablen anhand des Beispiels einer Schwerewelle untersucht sind.

5.1 Strömungscharakterisierung

Die Charakterisierung von Strömungen erfolgt mit dimensionslosen Kennzahlen, die Vergleiche dynamisch ähnlicher Strömungssituationen bei Umströmung geometrisch ähnlicher Körper ermöglichen. In physikalischen Modellversuchen an geometrisch verkleinerten Modellen sind diese Kennzahlen wesentlich, um auf das reale Strömungsverhalten zu schließen. Die Herleitung der Kennzahlen erfolgt mit Dimensionsbetrachtungen aus den allgemeinen Bewegungsgleichungen, wobei Referenzgrößen wie die Bezugslänge L und die Bezugsgeschwindigkeit V eingeführt werden. Einige der für Zwei-Fluid-Strömungen wesentlichen Kennzahlen sind nachfolgend näher erläutert. Weitere Kennzahlen sind z. B. in [71, 85, 160] angegeben.

Reynolds-Zahl. Das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskräften ist mit der Reynolds-Zahl

$$Re = \frac{\rho V L}{\mu} \quad (5.1)$$

gegeben. Sie ist eine der wichtigsten Strömungskennwerte und erlaubt quantitative Aussagen über laminare und turbulente Strömungszustände. Verschiedene Strömungen mit gleichen Reynoldszahlen sind sich in ihrem Turbulenzverhalten ähnlich. Unterhalb eines aufgabenspezifisch unterschiedlichen kritischen Wertes der Reynolds-Zahl verhalten sich Strömungen laminar, bei Überschreiten dieses Wertes schlägt die Strömung um und verhält sich turbulent.

Froude-Zahl. Das Verhältnis von Trägheits- zu Schwerkraften ist mit der Froude-Zahl

$$Fr = \frac{V}{\sqrt{gL}} \quad (5.2)$$

gegeben. Darin entspricht \sqrt{gL} der Wellengeschwindigkeit von Schwerewellen in einem Gravitationsfeld g . Die Froude-Zahl ist eine wichtige Kenngröße von Strömungen mit freier Oberfläche und erlaubt z. B. quantitative Aussagen über strömendes und schießendes Fließverhalten von Fluiden in offenen Gerinnen. Schwerewellen in unterschiedlichen Strömungen mit gleichen Froude-Zahlen sind sich geometrisch ähnlich.

Weber-Zahl. Das Verhältnis von deformierenden Trägheits- zu stabilisierenden Oberflächenkräften eines Zwei-Fluid-Systems ist mit der Weber-Zahl

$$We = \frac{\rho V^2 L}{\sigma_0} \quad (5.3)$$

gegeben. Darin spiegelt ρV^2 den dynamischen Druck und σ_0/L die Oberflächenspannung wider. Die Weber-Zahl ist eine wichtige Kenngröße von Systemen mit ausgeprägten Oberflächenspannungen und erlaubt quantitative Aussagen über den Zerfall von Fluiden mit vernachlässigbarer Viskosität. Mehrfluidsysteme mit gleichen Weber-Zahlen sind sich hinsichtlich des Zerfalls- und Zerstäubungsverhaltens ähnlich.

Ohnesorg-Zahl. Sind stabilisierende Zähigkeitskräfte bei der Deformation von Tropfen und Blasen nicht vernachlässigbar, dann ist die Ohnesorg-Zahl

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} = \frac{\mu}{\sqrt{L \rho \sigma_0}} \quad (5.4)$$

von Bedeutung. In Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl erlaubt die Ohnesorg-Zahl qualitative Aussagen zur Fluidzerstäubung von Freistrahlen. Verschiedene Freistrahlen mit gleichen Ohnesorg- und Reynolds-Zahlen weisen ähnliches Zerstäubungsverhalten auf.

5.2 Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung gekoppelter viskoser Fluide

Die stabilisierte zeitdiskontinuierliche Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung der Modellgleichungen inkompressibler nicht-Newton'scher Fluide für die Gebiete $Q_n^i, i = \{1, 2\}$ der Raum-Zeit-Scheibe Q_n mit den Dirichlet-Rändern $P_n^{D,i}$ und den Neumann-Rändern $P_n^{N,i}$ hat die Form

$$\sum_{i=1}^2 \left\{ \int_{Q_n^i} \delta \mathbf{v} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{b} \right) dQ \right. \quad (5.5a)$$

$$+ \int_{Q_n^i} \left(\mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) : \mathbf{T}^{\text{dev}} - (\nabla \cdot \delta \mathbf{v}) p \right) dQ \quad (5.5b)$$

$$+ \int_{Q_n^i} \delta p (\nabla \cdot \mathbf{v}) dQ \quad (5.5c)$$

$$+ \int_{\Omega_n^i} \delta \mathbf{v}(t_n^+) \llbracket \rho \mathbf{v} \rrbracket_n d\Omega \quad (5.5d)$$

$$+ \sum_e \int_{Q_{n,e}^i} \mathcal{L}_M(\delta \mathbf{v}, \delta p) \frac{1}{\rho} \tau_{\text{MOM}} \left(\mathcal{L}_M(\mathbf{v}, p) - \rho \mathbf{b} \right) dQ \quad (5.5e)$$

$$+ \sum_e \int_{Q_{n,e}^i} \mathcal{L}_C(\delta \mathbf{v}) \rho \tau_{\text{CONT}} \mathcal{L}_C(\mathbf{v}) dQ \quad (5.5f)$$

$$- \int_{P_n^{D,i}} \delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{t} dP + \int_{P_n^{D,i}} \delta \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}) dP \quad (5.5g)$$

$$- \int_{P_n^{N,i}} \delta \mathbf{v} \cdot \bar{\mathbf{t}} dP + \text{G.T.} \} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{v}, \delta p, \delta \mathbf{t} . \quad (5.5h)$$

Zeilen (5.5a) und (5.5b) zeigen die schwache Form der Impulsbilanz (2.21) nach Standard-Galerkin-Wichtung und anschließender partieller Integration. Mit Zeile (5.5b) ist die Materialgleichung (2.25) des Fluids berücksichtigt. Darin ist der Deviatoranteil \mathbf{T}^{dev} entweder im Sinne einer Weggrößenformulierung direkt eingesetzt oder im Rahmen einer gemischt-hybriden Formulierung als zusätzlicher Term formuliert, der dann auf Elementebene abgelöst wird und der Kopplung verschiedener Teilkontinua dient [167]. Die Berücksichtigung der Materialgleichung an der schwachen Form ist in Abhängigkeit von der gewählten Kopplungsmethodik in Abschnitt 5.2.1 präzisiert. In Zeile (5.5c) folgt die Standard-Galerkin-Formulierung der Kontinuitätsgleichung (2.18), die die Inkompressibilität des Fluids in schwacher Form erzwingt. Der Sprungterm des zeitdiskontinuierlichen Galerkin-Verfahrens in Zeile (5.5d) ist mit der Stetigkeitsbedingung (2.46) formuliert und gewährleistet die Impulserhaltung zwischen benachbarten Zeitscheiben in integraler Form. In den Zeilen (5.5e) und (5.5f) ist die Galerkin/Least-squares Stabilisierung der schwachen Form angegeben. Darin sind \mathcal{L}_M und \mathcal{L}_C die Residuen der jeweiligen starken Formen (2.18) und (2.21),

$$\mathcal{L}_C(\mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{v} \quad , \quad (5.6)$$

$$\mathcal{L}_M(\mathbf{v}, p) = \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) - \nabla \cdot \mathbf{T}(\mathbf{v}, p) \quad . \quad (5.7)$$

Die Stabilisierung in Zeile (5.5e) verhindert unphysikalische numerische Oszillationen bei konvektionsdominierten Strömungen und ermöglicht die Verwendung ordnungsgleicher Polynomansätze für Geschwindigkeiten und Druck, während die Stabilisierung in Zeile (5.5f) zu verbesserter Konvergenz und Stabilität des numerischen Verfahrens bei hohen Reynolds-Zahlen beiträgt. Die elementweise formulierten Stabilisierungsparameter τ_{MOM} und τ_{CONT} werden mit den von Hübner [71] gegebenen Definitionen ermittelt. Das erste Randintegral in Zeile (5.5g) entsteht bei der partiellen Integration der Impulsbilanz und dient der Bestimmung der Randspannungen auf dem Dirichlet-Rand, die als unabhängige Zustandsgrößen zu ermitteln sind, wenn der zweite Term in Zeile (5.5g) die Dirichlet-Randbedingung in (2.37) im Rahmen einer Lagrange-Multiplikator-Formulierung lediglich in schwacher Form erfüllt. Sind eingeprägte Geschwindigkeiten auf dem Dirichlet-Rand direkt als Randbedingungen vorgegeben, verschwinden beide Terme. Auf dem Neumann-Rand eingeprägte Randspannungen sind nach Einsetzen der Neumann-Randbedingung in (2.37) mit dem ersten Term in Zeile (5.5h) berücksichtigt. Der zweite Term „G.T.“ in Zeile (5.5h) steht für die zu berücksichtigenden Grenzflächenterme, die der Kopplung der interagierenden Fluide dienen und deren Umsetzung im Rahmen der schwachen Formulierung detailliert in Abschnitt 5.2.2 erläutert ist.

Unter der Voraussetzung, dass Grenzflächeninformationen aus einer Level-Set-Funktion im Gebiet ermittelt sind, erfolgt die numerische Lösung der Modellgleichungen inkompressibler nicht-Newton'scher Fluide im Raum-Zeit-Gebiet Q durch sequentielle Auswertung von (5.5) für alle Raum-Zeit-Scheiben Q_0, \dots, Q_{N-1} und beginnt nach (2.36) mit der Anfangsbedingung

$$\mathbf{v}(t_0^-) = \mathbf{v}_a \quad \text{in} \quad \Omega_a \quad . \quad (5.8)$$

Beschreibungsvariablen der Formulierung sind die Geschwindigkeiten \mathbf{v} , der Druck p und die Randspannungen \mathbf{t} , wenn Dirichlet-Randbedingungen lediglich in schwacher Form eingebracht sind. Innerhalb einer Raum-Zeit-Scheibe sind die Zustandsgrößen C_0 -stetig und an den Übergängen benachbarter Zeitscheiben C_0 -unstetig approximiert. Die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzten isoparametrischen 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelemente interpolieren alle Variablenkomponenten mit linearen Polynomansätzen. In reproduzierenden und Blendelementen sind aufgabenspezifisch erweiterte Ansätze für Drücke und Geschwindigkeiten verwendet.

5.2.1 Einbringen der Materialgleichung

Die Berücksichtigung des Deviatoranteils \mathbf{T}^{dev} in Zeile (5.5b) der schwachen Form erfolgt in dieser Arbeit hauptsächlich mit direkter Berücksichtigung der Materialgleichung (2.25) im Sinne einer Weggrößenformulierung. Zeile (5.5b) folgt dann mit

$$\sum_{i=1}^2 \int_{Q_n^i} \left(\mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) : 2\eta(\dot{\gamma}, \tau^0) \mathbf{D}(\mathbf{v}) - (\nabla \cdot \delta \mathbf{v}) p \right) dQ \quad . \quad (5.9)$$

Darin ist die Kinematik (2.10) exakt erfüllt, die Werkstoffgleichung jedoch nur für den Fall linear-viskosen Materialverhaltens. Sie wird jedoch bei nichtlinearen Werkstoffgesetzen innerhalb der globalen Iteration sukzessive angenähert. Bei Oberflächenkopplung der beteiligten Fluide mit Nitsche's Methode [113] ist die Materialgleichung in allen Elementen der Diskretisierung mit (5.9) berücksichtigt.

Bei der im Rahmen dieser Arbeit ebenfalls untersuchten Kopplungsmethodik mit örtlich formulierten gemischt-hybriden Elementen nach Zilian & Fries [167] unterscheidet sich die Berücksichtigung der Materialgleichung an der schwachen Formulierung dahingehend, dass Deviatorspannungen auf Elementebene reproduzierender Elemente als zusätzliche Freiwerte formuliert sind. Die Materialgleichung (2.25) ist dann als schwache Form auf Elementebene zur schwachen Form der Modellgleichungen hinzugefügt,

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^2 \left\{ \int_{Q_n^i} \left(\mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) : \mathbf{T}^{\text{dev}} - (\nabla \cdot \delta \mathbf{v}) p \right) dQ \right. \\
& \quad \left. + \sum_{e \in \mathcal{E}^{\text{enr}}} \int_{Q_{n,e}^i} \delta \mathbf{T}^{\text{dev}} : \left(\frac{1}{2\eta(\dot{\gamma}, \tau^0)} \mathbf{T}^{\text{dev}} - \mathbf{D}(\mathbf{v}) \right) dQ \right\} .
\end{aligned} \tag{5.10}$$

In Blend- und Standardelementen der Diskretisierung erfolgt die Berücksichtigung der Materialgleichung jedoch weiterhin mit (5.9). Damit stehen auf Elementebene reproduzierender Elemente Spannungsfreiwerte zur Verfügung, die im Rahmen der Kopplung zweier Fluide zur Erzwingung der Stetigkeit von Beschreibungsvariablen über Grenzflächen hinweg eingesetzt werden können. Nach Ablösen der lediglich elementweise definierten Spannungsfreiwerte sind auf Systemebene keine zusätzlichen Freiwerte zu berücksichtigen. Im Rahmen der verwendeten isoparametrischen 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelemente sind auch die Spannungen innerhalb einer Zeitscheibe mit linearen Polynomansätzen in Raum und Zeit approximiert. Dabei kommen erweiterte Spannungsansätze zum Einsatz, die grenzflächenunstetige Lösungsverläufe mit der Signumanreicherung (4.16) annähern.

5.2.2 Einbringen von Übergangsbedingungen

Die partielle Integration der mit der Geschwindigkeitsvariation gewichteten und über die Raum-Zeit-Scheibe Q_n integrierten Impulsbilanz (2.19) führt auf zusätzliche Randterme. Diese sind mit eingepprägten Randgeschwindigkeiten und eingepprägten Randspannungen für die Gebietsränder P_n des Berechnungsgebietes bereits in der schwachen Form (5.5) berücksichtigt. Auf den Grenzflächen dienen diese Terme zur Kopplung der interagierenden Fluide. Dafür ist die Grenzfläche R_n betrachtet, die die Raum-Zeit-Gebiete Q_n^1 und Q_n^2 voneinander trennt. Mit den beiden Grenzflächenseiten R_n^1 und R_n^2 und den darauf auszuwertenden Randtermen folgt

$$\text{G.T.} = - \int_{R_n^1} \delta \mathbf{v}_1 \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1 dR - \int_{R_n^2} \delta \mathbf{v}_2 \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2 dR = \int_{R_n} \llbracket \delta \mathbf{v} \mathbf{T} \rrbracket \cdot \bar{\mathbf{n}} dR . \tag{5.11}$$

Darin sind die Spannungstensoren und die Geschwindigkeitswichtungen der grenzflächenseitigen Teilgebiete mit den die jeweilige Gebietszugehörigkeit angegebenden Indizes gekennzeichnet. Der Grenzflächennormalenvektor $\bar{\mathbf{n}} = \mathbf{n}_2 = -\mathbf{n}_1$ ist entsprechend Bild 2.3 definiert. Nach Umformung des Integranden der rechten Seite von (5.11) folgt

$$\llbracket \delta \mathbf{v} \mathbf{T} \rrbracket \cdot \bar{\mathbf{n}} = \llbracket \delta \mathbf{v} \rrbracket \{ \mathbf{T} \} \cdot \bar{\mathbf{n}} + \langle \delta \mathbf{v} \rangle \llbracket \mathbf{T} \rrbracket \cdot \bar{\mathbf{n}} , \tag{5.12}$$

mit den Wichtungsoperatoren

$$\{ (*) \} = \xi_1 \cdot (*)_1 + \xi_2 \cdot (*)_2 \quad \text{und} \quad \langle (*) \rangle = \xi_2 \cdot (*)_1 + \xi_1 \cdot (*)_2 \tag{5.13}$$

und dem Sprungterm $\llbracket (*) \rrbracket$ nach (2.40). Für die Wichtungsfaktoren ξ_1 und ξ_2 gilt $\xi_1 + \xi_2 = 1$, $0 \leq \xi_1, \xi_2 \leq 1$. Im Rahmen dieser Arbeit ist die Definition der Wichtungsfaktoren nach Hansbo & Hansbo [60] umgesetzt. Dafür wird das Elementgebiet $Q_{n,e}$ eines Elementes der Raum-Zeit-Scheibe Q_n betrachtet. Wenn das Elementgebiet von der Grenzfläche R_n geschnitten ist, erfolgt die Unterteilung des Elementgebietes in grenzflächenseitige Elementteilgebiete $Q_{n,e}^1 = Q_{n,e} \cap Q_n^1$ und $Q_{n,e}^2 = Q_{n,e} \cap Q_n^2$, wie in Bild 5.1 skizziert. Die Definition der Wichtungsfaktoren erfolgt dann mit den Volumina $|\cdot|$ der jeweils eingeschlossenen Gebiete,

$$\xi_1 = \frac{|Q_{n,e}^1|}{|Q_{n,e}|} \quad , \quad \xi_2 = \frac{|Q_{n,e}^2|}{|Q_{n,e}|} \quad \text{mit} \quad |Q_{n,e}^1| + |Q_{n,e}^2| = |Q_{n,e}| \quad . \quad (5.14)$$

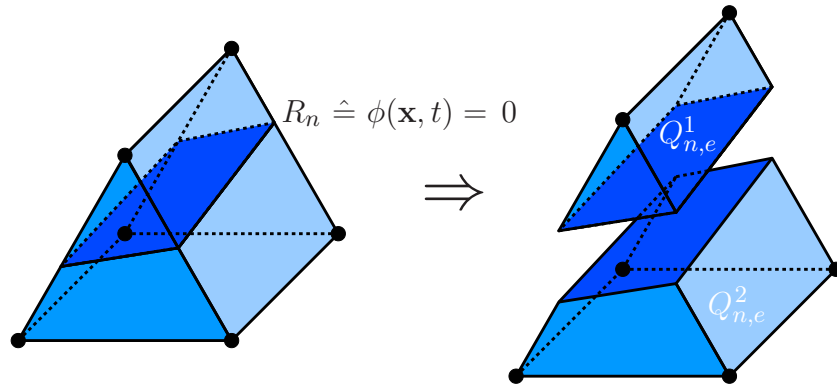


Bild 5.1: Aufteilung eines Elementes in Elementteilgebiete anhand der Grenzflächenlage im Element.

Das Einsetzen der Übergangsbedingungen (2.42) in die mit (5.12) umgeformte rechte Seite der Grenzflächenterme (5.11) führt auf die schwache Form der Grenzflächenimpulsbilanz,

$$\int_{R_n} \llbracket \delta \mathbf{v} \mathbf{T} \rrbracket \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR = \int_{R_n} \llbracket \delta \mathbf{v} \rrbracket \{ \mathbf{T} \} \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR - \int_{R_n} \langle \delta \mathbf{v} \rangle p^c \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR \quad . \quad (5.15)$$

Die Kontinuität der Grenzflächengeschwindigkeiten (2.41) wird mit dem zusätzlichen Term

$$- \int_{R_n} \bar{\mathbf{n}} \cdot \{ \delta \mathbf{T} \} \llbracket \mathbf{v} \rrbracket \, dR \quad (5.16)$$

in der schwachen Form der Kopplungsbedingungen berücksichtigt. Anzumerken ist, dass der erste Term der rechten Seite von (5.15) und der zusätzliche Term (5.16) eine schiefsymmetrische Grenzflächenformulierung der Übergangsbedingungen bilden. Diese ist konform zur schwachen Form der Modellgleichungen in (5.5) und führt auf ein Verfahren mit besseren Stabilitätseigenschaften als symmetrische Grenzflächenformulierungen [6, 24].

Nitsche's Methode. Die vorgestellten Terme (5.15) und (5.16) der Oberflächenkopplung bilden die Grundlage der Grenzflächenformulierung nach Nitsche's Methode [113]. Dabei werden jedoch keine neuen Freiwerte eingeführt und die darin auftretenden Spannungen sowie Spannungswichtungen mit den jeweiligen Geschwindigkeits- und Druckfreiwerten in (2.25) sowie

deren Wichtungen ausgedrückt. Die Kopplung mit lediglich den aufgeführten Termen führt jedoch im Allgemeinen auf instabile numerische Verfahren, so dass ein zusätzlicher Term

$$+ \int_{R_n} \llbracket \delta \mathbf{v} \rrbracket \theta \llbracket \mathbf{v} \rrbracket dR \quad (5.17)$$

zur schwachen Form der Grenzflächenformulierung hinzuzufügen ist. (5.17) ist ein Penalty-Term, der den Geschwindigkeitssprung $\llbracket \mathbf{v} \rrbracket \neq 0$ der Näherungslösung auf der Grenzfläche bestraft und bei entsprechend gewähltem Penalty-Faktor θ die Stabilität des numerischen Verfahrens zur Oberflächenkopplung von Teilkontinua gewährleistet. Die künstlichen Terme (5.16) und (5.17) verschwinden, wenn die in (2.41) formulierte Forderung nach einem grenzflächenstetigen Geschwindigkeitsfeld auf dem Kopplungsrand erfüllt ist. Damit lässt sich die schwache Form der Oberflächenkopplung mit den natürlichen (aus partieller Integration) Randtermen (5.15) und den zusätzlich im Rahmen von Nitsche's Methode eingeführten künstlichen Termen (5.16) und (5.17) als konsistente Penalty-Methode interpretieren. Andererseits besitzt die Methodik Ähnlichkeit mit stabilisierten Lagrange-Multiplikator-Formulierungen [145], wodurch der Penalty-Faktor θ auch als Stabilisierungsparameter im Rahmen einer Galerkin / Least-Squares-Stabilisierung interpretierbar ist. Der elementweise definierte Penalty-Faktor $\theta > 0$ ist ausreichend groß zu wählen, so dass die resultierende Systemmatrix positiv definit ist. Die von Mergheim [101] für lineare Elastizität verwendete Abhängigkeit des Penalty-Faktors von der Elementgröße und den Materialparametern wird im Rahmen dieser Arbeit mit

$$\theta = \vartheta \cdot \frac{\eta^{max}}{h_e} \quad (5.18)$$

auf fluidmechanische Aufgabenstellungen übertragen. Darin ist ϑ eine material- und elementunabhängige skalarwertige Konstante, η^{max} ist die größere der effektiven Viskositäten der beiden grenzflächenseitigen Fluide und h_e ist ein lokales räumliches Längenmaß des grenzflächengeschnittenen Elementes. Obwohl Embar et al. [43] eine Methodik zur Berechnung des Faktors ϑ vorstellen, ist er der Einfachheit halber in den hier gewählten Beispielen a priori gewählt.

Örtlich gemischt-hybride Kopplungsmethode. Im Rahmen der von Zilian & Fries [167] vorgestellten Kopplungsmethodik mit lediglich örtlich im Bereich von Grenzflächen gemischt-hybrid formulierten Elementen sind die auf Elementebene eingeführten Spannungsansätze anstelle Lagrange'scher Multiplikatoren zur Grenzflächenkopplung der Geschwindigkeiten herangezogen. Die in den Termen (5.15) und (5.16) der Oberflächenkopplung auftretenden Spannungen und Spannungswichtungen lassen sich so konsistent in die schwache Form (5.10) der Materialgleichung einbinden. Mit dem Ablösen der Spannungsfreiwerte auf Elementebene erfolgt dann gleichzeitig auch die Kopplung des Geschwindigkeitsfeldes über die Grenzfläche. Die Methodik ähnelt Nitsche's Methode, wobei die auf Elementebene abgelösten Spannungsansätze zumindest teilweise die stabilisierende Wirkung des Penalty-Terms (5.18) übernehmen. So sind sowohl die Elementgröße in Form der über das Elementgebiet integrierten Ansätze als auch die Materialkennwerte der in den Elementteilgebieten vorliegenden Materialien mit der Materialgleichung in den abgelösten Spannungen berücksichtigt. In [167] ist z. B. gezeigt, dass die Anwendung der örtlich gemischt-hybriden Kopplungsmethode auf Aufgabenstellungen mit elliptischem Differentialoperator ohne zusätzliche stabilisierende Terme auskommt. Das Beispiel in Abschnitt 5.5 veranschaulicht jedoch, dass das Hinzufügen eines (5.17) zumindest ähnlichen

Stabilisierungsterms positiven Einfluss auf die Massenerhaltung bewegter Grenzflächen haben kann. Der höhere numerische Aufwand zum Ablösen der Spannungsfreiwerte ist zwar als negativ zu bewerten, ist aber im Vergleich zur Berechnungszeit zum Lösen der physikalischen Aufgabenstellung vernachlässigbar.

5.2.3 Laplace-Beltrami-Formulierung

Neben der direkten Ermittlung von Grenzflächenkrümmungen zur Erfassung signifikanter Oberflächenspannungsphänomene hat sich im Rahmen der Finite-Element-Methode die Laplace-Beltrami-Formulierung als Alternative etabliert [51, 58, 76]. Dafür ist der Oberflächenspannungsterm auf der rechten Seite von (5.15) mit Gleichung (2.43) umgeformt,

$$\int_{R_n} \langle \delta \mathbf{v} \rangle p^c \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR = \int_{R_n} \langle \delta \mathbf{v} \rangle \sigma_0 \kappa \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR \quad . \quad (5.19)$$

Um (5.19) mithilfe des Laplace-Beltrami-Operators auf einer Grenzfläche Σ_t zum Zeitpunkt t auszudrücken, ist zunächst der tangentielle Gradient

$$\underline{\nabla} f(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(\mathbf{x}) \nabla f(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{P}(\mathbf{x}) = \mathbf{1} - \bar{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \otimes \bar{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \quad , \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad (5.20)$$

einer in der offenen Nachbarschaft der Grenzfläche zweimal differenzierbaren Funktion $f(\mathbf{x})$ eingeführt. Darin ist $\mathbf{P}(\mathbf{x})$ der Projektionsoperator auf den Tangentenraum und \otimes das dyadische Produkt. Die Einträge des tangentialen Gradienten $\underline{\nabla}$ sind die Richtungsableitungen in Tangentialrichtung. Der Laplace-Beltrami-Operator $\underline{\Delta}$ auf Σ_t ist als tangentielle Divergenz des tangentialen Gradienten definiert,

$$\underline{\Delta} f(\mathbf{x}) = \underline{\nabla} \cdot (\underline{\nabla} f(\mathbf{x})) \quad , \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad . \quad (5.21)$$

Mit dem differentialgeometrischen Zusammenhang

$$\underline{\Delta} \text{id}(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}) \cdot \bar{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \quad , \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma_t \quad (5.22)$$

zwischen der Identitätsabbildung $\text{id} = [x \ y \ z]^T$ auf Σ_t und dem Krümmungsvektor der mittleren Krümmung $\kappa(\mathbf{x}) \cdot \bar{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ der Grenzfläche wird (5.19) umgeformt,

$$\int_{R_n} \langle \delta \mathbf{v} \rangle \sigma_0 \kappa \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR = \int_{R_n} \langle \delta \mathbf{v} \rangle \sigma_0 \underline{\Delta} \text{id} \, dR \quad . \quad (5.23)$$

Nach Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes auf (5.23) und unter Berücksichtigung von $\underline{\nabla} \text{id} = \mathbf{P}$ sowie $\langle \underline{\nabla} \delta \mathbf{v} \rangle : \mathbf{P} = \langle \nabla \delta \mathbf{v} \rangle : \mathbf{P}$ folgt die im Rahmen dieser Arbeit umgesetzte schwache Form der Laplace-Beltrami-Krümmungsformulierung,

$$\int_{R_n} \langle \delta \mathbf{v} \rangle \sigma_0 \underline{\Delta} \text{id} \, dR = \int_{\partial R_n} \sigma_0 \langle \delta \mathbf{v} \rangle \mathbf{P} \cdot \mathbf{n}_P \, d\partial R - \int_{R_n} \sigma_0 \langle \nabla \delta \mathbf{v} \rangle : \mathbf{P} \, dR \quad , \quad (5.24)$$

mit dem den Gebietsrand berührenden Raum-Zeit-Grenzflächenrand ∂R_n der Raum-Zeit-Scheibe Q_n und dem äußeren Normalenvektor \mathbf{n}_P des Berechnungsgebietes. Formulierung (5.24) hat den Vorteil, dass explizite Krümmungsberechnungen entfallen und nur Grenzflächennormalenvektoren zu berücksichtigen sind. Bei Aufgabenstellungen mit randberührenden Grenzflächen ist jedoch die Kenntnis von Grenzflächennormalen auf dem Gebietsrand notwendig.

5.2.4 Lösungsstrategie für das gekoppelte Gesamtsystem

Die schwache Form der Modellgleichungen zweier gekoppelter inkompressibler Fluide für die Raum-Zeit-Scheibe Q_n umfasst die schwache Form (5.5), die je nach Kopplungsmethode verwendeten Terme (5.9), (5.10) der Materialgleichung sowie die Grenzflächenkopplungsterme (5.15), (5.16) und (5.17). Bei Verwendung von Laplace-Beltrami-Operatoren wird (5.24) anstelle des zweiten Terms der rechten Seite von (5.15) verwendet. Die Diskretisierung der schwachen Form der Modellgleichungen führt auf ein System

$$\hat{\mathbf{K}}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{b}} \quad (5.25)$$

gekoppelter algebraischer Gleichungen, mit der Koeffizientenmatrix $\hat{\mathbf{K}}$, dem Vektor der Unbekannten $\hat{\mathbf{x}}$ und dem Lastvektor $\hat{\mathbf{b}}$ der rechten Seite. Das nichtlineare Gleichungssystem (5.25) ist mit einem Picard-Iterationsschema linearisiert und resultiert im Gleichungssystem

$$\hat{\mathbf{K}}_m(\hat{\mathbf{x}}_{m-1}) \hat{\mathbf{x}}_m = \hat{\mathbf{b}}_m \quad (5.26)$$

für den m -ten Iterationsschritt innerhalb der betrachteten Raum-Zeit-Scheibe. Die Komponenten der linearisierten Gleichungen des gekoppelten Systems sind die unbekannten Vektoren $\hat{\mathbf{v}}^1$ und $\hat{\mathbf{v}}^2$ der Geschwindigkeiten sowie $\hat{\mathbf{p}}^1$ und $\hat{\mathbf{p}}^2$ der Drücke der jeweils mit hochstehenden Indizes gekennzeichneten Fluidteilgebiete. Bei lediglich schwach eingebrachten Dirichlet-Randbedingungen sind auch die als Lagrange-Multiplikatoren formulierten Randspannungen $\hat{\mathbf{t}}$ Freiwerte des Gleichungssystems. Die Vektoren der diskreten Beschreibungsvariablen enthalten neben den Unbekannten der Feldgrößen aufgabenspezifisch zusätzliche Unbekannte aus der erweiterten FEM-Formulierung. Unter Vernachlässigung von Druck- und Randspannungsfreiwerten ist das resultierende Gleichungssystem schematisch in Bild 5.2 dargestellt.

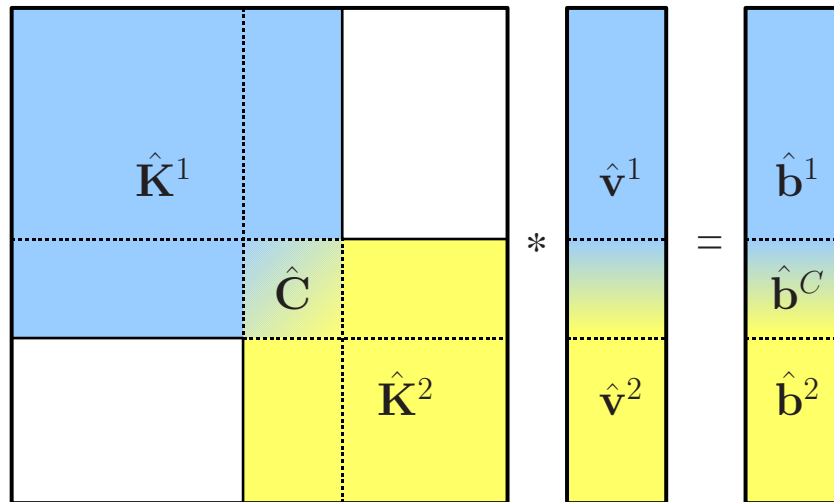


Bild 5.2: Gesamtgleichungssystem der algebraischen Gleichungen gekoppelter Fluide.

Die Koeffizientenmatrizen $\hat{\mathbf{K}}^1$ und $\hat{\mathbf{K}}^2$ beider Fluide sind mit Verwendung der Geschwindigkeitsfreiwerte $\hat{\mathbf{v}}_{m-1}^1$ und $\hat{\mathbf{v}}_{m-1}^2$ innerhalb des m -ten Iterationsschrittes im konvektiven Term von (5.5a) linearisiert. Die Vektoren $\hat{\mathbf{b}}^1$ und $\hat{\mathbf{b}}^2$ bringen massenbezogene Beschleunigungen

ein, während im Vektor $\hat{\mathbf{b}}^C$ zusätzliche Grenzflächenquellterme aus Oberflächenspannungen berücksichtigt sind. Die Kopplungsmatrix $\hat{\mathbf{C}}$ bringt die Terme zur Kopplung der Feldgrößen auf der linken Seite des Gleichungssystems ein, so dass das Verhalten des Gesamtsystems vollständig mit der Systemmatrix beschrieben ist. Das Gleichungssystem wird mit einem direkten Gleichungslöser aus der UMFPACK-Softwarebibliothek gelöst.

Die Lösung der diskretisierten Modellgleichungen gekoppelter Fluide im Rahmen eines numerischen Verfahrens ist ein elementarer Bestandteil der Modellierung von Zweifluidströmungen. Darüber hinaus ist die Bewegungsbeschreibung des Kopplungsrandes ebenfalls wesentlich für die Modellierung, denn die zeitveränderliche Grenzflächenlage beeinflusst maßgeblich das Strömungsverhalten, ist andererseits aber auch maßgeblich durch das Strömungsverhalten bestimmt. Treten zusätzlich signifikante Oberflächenspannungsphänomene auf, dann ist neben der Grenzflächenlage auch die Grenzflächenkrümmung essentiell für das zu beschreibende Systemverhalten. Damit sind die physikalischen Modellgleichungen, die Bewegungsbeschreibung des Kopplungsrandes sowie dessen Geometrieeigenschaften stark miteinander gekoppelt, wodurch die ganzheitliche Modellierung bewegter oberflächengekoppelter Teilkontinua geeignete und dem nichtlinearen Systemverhalten angepasste Lösungsstrategien erfordert. Die algorithmische Umsetzung der hier im Rahmen einer äußeren Picard-Iteration voneinander entkoppelt gelösten Teilaufgaben ist in Bild 5.3 dargestellt.

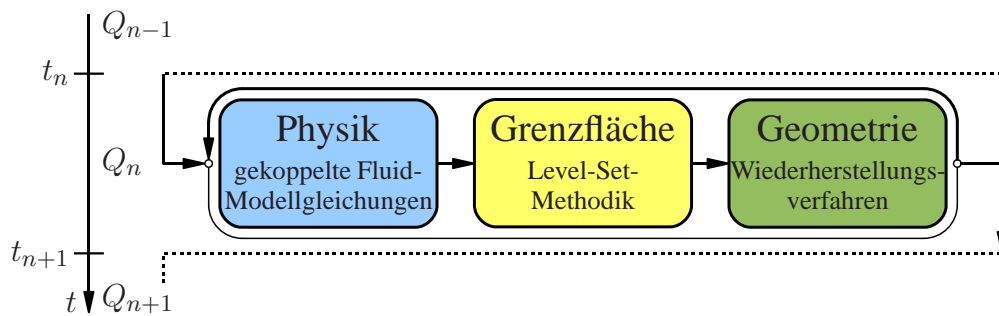


Bild 5.3: Picard-Iterationsschema zur Lösung der gekoppelten nichtlinearen Modellgleichungen.

Innerhalb des m -ten Picard-Iterationsschrittes der Raum-Zeit-Scheibe Q_n erfolgt zunächst die Lösung des linearisierten Systems der diskretisierten physikalischen Modellgleichungen. Die aus der Level-Set-Funktion des $(m - 1)$ -ten Iterationsschrittes interpolierte Grenzflächenlage liefert dabei wesentliche Informationen zum Aufbau des Gleichungssystems. Neben der Ermittlung von Netzknoten mit zu erweiternden Ansätzen dient die Grenzflächenlage sowohl der Zerlegung grenzflächengeschnittener Elemente im Rahmen der modifizierten numerischen Integration unstetiger Ansätze als auch der Ermittlung grenzflächenseitiger Materialkennwerte. Weiterhin fließen Grenzflächennormale und -krümmung beim Aufbau der Elementuntermatrizen und -vektoren zur Grenzflächenkopplung als geometrische Informationen in das zu lösende Gleichungssystem ein. Nach dem Lösen der Physikgleichungen liegt die Geschwindigkeitslösung zum Aufbau des Level-Set-Gleichungssystems vor. Die Level-Set-Lösung wiederum dient der Ermittlung geometrischer Grenzflächeneigenschaften. Nach jeder Picard-Iteration wird der Iterationsfortschritt mit entsprechenden Abbruchbedingungen überprüft. Bei Nichterfüllung ist neu zu iterieren. Mit hinreichender Konvergenz sind alle nichtlinearen Einflüsse und Koppelungseffekte berücksichtigt, so dass die Berechnung der folgenden Zeitscheibe beginnen kann.

5.3 Stehende Kapillarwelle

Bei diesem Testfall wird die infolge einer vorgegebenen Anfangsauslenkung und mit fortschreitender Zeit abklingende freie Schwingung einer stehenden Kapillarwelle zwischen zwei linear-viskosen Fluiden untersucht. Die Berechnung erfolgt mit den gleichen Testparametern, die auch von Popinet & Zaleski [124] gewählt sind. Die Ausgangskonfiguration des Testfalles ist in Bild 5.4 dargestellt und umfasst einen quadratischen Behälter mit den Abmessungen $L = H = 2\pi$, der durch eine um die Ruheposition oszillierende sinusförmige Grenzfläche in zwei Teilgebiete unterteilt ist. Zusätzlich ist ein weiterer Testfall mit $H = 3L = 6\pi$ untersucht, um die in [123] vermutete Abhängigkeit der Konvergenzrate von der Behälterhöhe zu zeigen. Für beide Testfälle ist das Normalenvektorfeld mit ZZ-PR-Wiederherstellung ermittelt. Ausgehend davon sind elementweise konstante sowie mit einer nachgeschalteten ZZ-PR-Routine elementweise lineare Oberflächenkrümmungswerte im Rahmen dieser Arbeit zur Berechnung herangezogen und verglichen. Auf Grundlage des Normalenvektorfeldes ist anstelle expliziter Krümmungsberechnungen auch die Auswertung der schwachen Form (5.24) des Laplace-Beltrami-Operators auf der Grenzfläche möglich. Entsprechende Ergebnisse sind ebenfalls angegeben, wobei auch dafür Normalenvektorfelder aus ZZ-PR-Wiederherstellung verwendet sind. Ergebnisse von Testrechnungen mit direkt aus der Level-Set-Lösung ermittelten Normalenvektoren zeigten deutlich ungenauere Lösungen bei schlechterem Konvergenzverhalten und sind hier nicht angegeben. Die Level-Set-Funktion ist nach jedem Zeitschritt reinitialisiert, da größere Reinitialisierungsabstände in Testrechnungen ungenauere Ergebnisse aufwiesen.

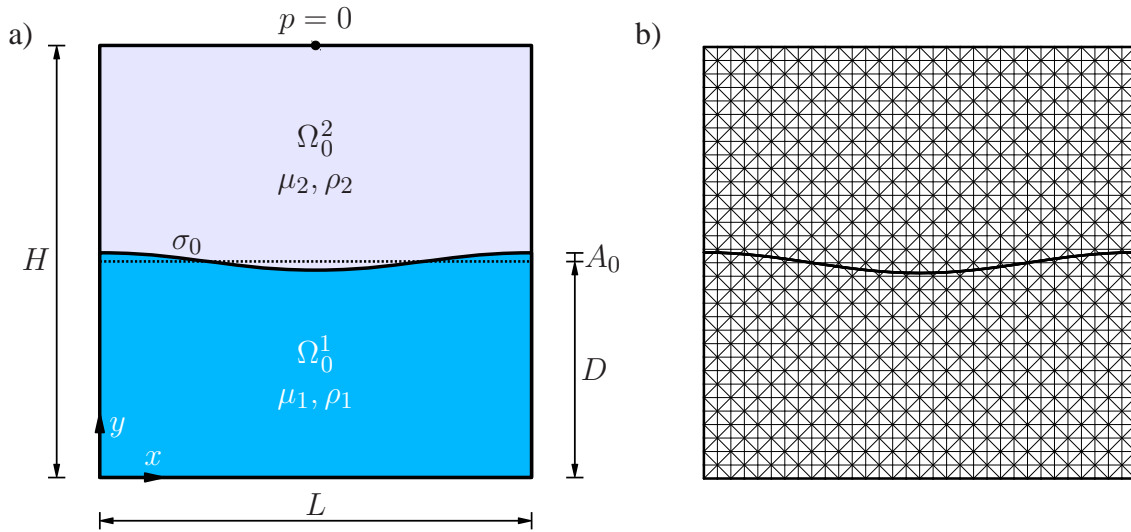


Bild 5.4: Kapillarwelle: a) System mit initialer Gebietsverteilung, b) Diskretisierung mit $d_n = \lambda/32$.

Die initiale Gebietsverteilung der Fluide 1 und 2 in den jeweiligen Subgebieten Ω_t^1 und Ω_t^2 ist mit den Gebietsgrenzen und der anfänglichen Grenzflächenposition

$$\eta_0 = D + A_0 \sin(k(x + 0,5 \cdot \pi)) \quad (5.27)$$

zum Zeitpunkt $t = 0$ gegeben und in Bild 5.4 a) skizziert. Da die Wellenlänge λ der Gebietsbreite 2π entspricht, folgt die Kreiswellenzahl $k = 2\pi/\lambda = 1$. Die anfängliche Wellenauslenkung A_0 ist zu $1/100$ der Wellenlänge λ gewählt und die Ruheposition der Grenzfläche befindet sich auf

halber Behälterhöhe, $D = H/2$. Unter Vernachlässigung massenbezogener Beschleunigungen ist die Bewegung der Grenzfläche lediglich von den dort wirkenden Oberflächenspannungen angetrieben. Mit gegebener Ohnesorg-Zahl $Oh = \mu / \sqrt{\rho \sigma_0 \lambda} = 1/\sqrt{3000}$, gebietsweise gleich gewählten Dichten $\rho_1 = \rho_2 = 1$ und gewähltem Oberflächenspannungskoeffizienten $\sigma_0 = 2$ folgen die dynamischen Viskositäten $\mu_1 = \mu_2 = 0,06472$ beider Fluide. An Ober- und Unterseite des Behälters sind Gleitrandbedingungen gewählt, während links und rechts periodische Randbedingungen gesetzt sind. Zur Berücksichtigung der Periodizität ist das Geschwindigkeitsfeld an den jeweiligen Behälterseiten mittels Lagrange'scher Multiplikatoren gekoppelt. Darüber hinaus erfolgt die Kopplung von Normalen- und Krümmungswerten mit angepassten ZZ-PR-Routinen, bei denen die entsprechenden Randknoten geometriewerte aus den zusammengesetzten Elementpatches gebietsseitig zu koppelnder Paare periodischer Knoten ermittelt werden. Damit sind auch die Randterme der Laplace-Beltrami-Formulierung bekannt. In der Mitte des oberen Randes ist der Druck zu Null gesetzt. Die Berechnungen erfolgen auf regelmäßigen Ortsdiskretisierungen mit in Koordinatenrichtungen äquidistant angeordneten Knoten. Die räumlichen Knotenabstände d_n sind zu $\lambda/8$, $\lambda/16$, $\lambda/32$, $\lambda/64$ und $\lambda/128$ gewählt. Die Diskretisierung des quadratischen Berechnungsgebietes mit $d_n = \lambda/32$ ist in Bild 5.4 b) dargestellt. Zur numerischen Berechnung dieses Beispiels sind lediglich die Druckansätze erweitert. Die Zeitschrittweite aller Berechnungen im Intervall $I_t = (0,25)$ s ist zu $\Delta t = 0,0125$ s gewählt.

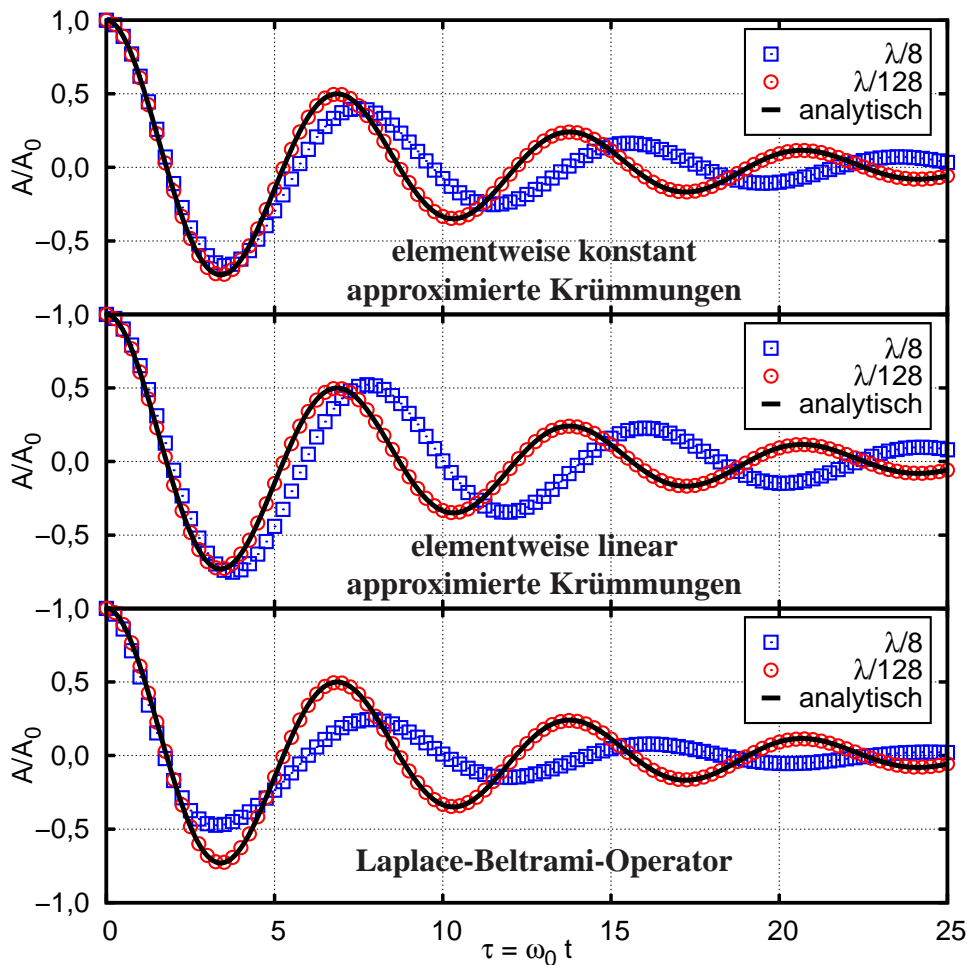


Bild 5.5: Oberflächenauslenkung am linken Behälterrand: Vergleich mit analytischer Lösung [126].

Bild 5.5 zeigt die dimensionslose Oberflächenauslenkung A/A_0 am linken Behälterrand, aufgetragen über der dimensionslosen Zeit $\tau = \omega_0 t$ mit $\omega_0^2 = \sigma_0 k^3 / (\rho_1 + \rho_2)$. Die Ergebnisse für elementweise konstante Krümmungen, elementweise lineare Krümmungen sowie unter Verwendung des Laplace-Beltrami-Operators sind für Knotenabstände von $\lambda/8$, $\lambda/128$ und einer Gebietshöhe $H = 3L$ mit der analytischen Lösung nach Prosperetti [126] verglichen. Bei größter Diskretisierung zeigen alle Lösungen sichtbare Amplituden- und Phasenfehler. Dabei ist die Fehlerentwicklung mit elementweise konstanten Krümmungswerten sowie bei Verwendung des Laplace-Beltrami-Operators konsistent, da die berechnete Amplitude im gesamten Zeitintervall stets kleiner als die analytisch ermittelte Amplitude ist. Dies trifft für elementweise lineare Krümmungswerte nicht zu, denn zu Beginn des Zeitintervalls ist die numerisch ermittelte Amplitude größer als die analytische und zum Ende des Zeitintervalls kleiner. Für feinste Diskretisierungen stimmen die Lösungen aus numerischer und analytischer Berechnung bei allen Methoden sehr gut überein und sind in der gewählten Darstellung nicht unterscheidbar. Einen besseren Vergleich liefert der relative Amplitudenfehler E_{Amp} , der nach [124] mit dem Effektivwert (root mean square) der durch die Anfangsamplitude A_0 geteilten Differenz zwischen numerisch und analytisch ermittelter Amplitude A^{num} und A^{ana} definiert ist,

$$E_{\text{Amp}} = \frac{1}{A_0} \sqrt{\frac{1}{\tau_E - \tau_0} \int_{\tau_0}^{\tau_E} (A^{\text{num}} - A^{\text{ana}})^2 d\tau} \quad . \quad (5.28)$$

Die Ermittlung des relativen Amplitudenfehlers erfolgt mit den Amplitudenwerten der linken Behälterseite für das dimensionslose Zeitintervall $I_\tau = (\tau_0, \tau_E) = (0, 25)$.

		λ / d_n				
Höhe	Methode	8	16	32	64	128
$H = L$	konstante Krümmung	0.16009	0.04395	0.01308	0.00655	0.00517
	lineare Krümmung	0.23197	0.06777	0.01905	0.00801	0.00556
	Laplace-Beltrami	0.20957	0.09594	0.03621	0.01078	0.00508
	PopZal [124]	0.2972	0.0778	0.0131	0.0098	0.0065
	Gerlach [52]	0.2960	0.0818	0.0069	0.0018	–
	Herrmann [64]	–	0.1116	0.0295	0.0114	0.0067
$H = 3L$	konstante Krümmung	0.15948	0.04003	0.00892	0.00226	0.00086
	lineare Krümmung	0.22781	0.06405	0.01494	0.00365	0.00120
	Laplace-Beltrami	0.18565	0.09308	0.03363	0.00851	0.00169
	Popinet [123]	0.1568	0.0279	0.00838	0.0018	0.000545

Tabelle 5.1: Relativer Amplitudenfehler E_{Amp} verschiedener Lösungsmethoden.

Tabelle 5.1 und Bild 5.6 fassen die Resultate zusammen für: beide Testfälle mit konstant und linear approximierten Oberflächenkrümmungen sowie unter Verwendung des Laplace-Beltrami-Operators, die Front-Tracking Methode nach Popinet & Zaleski [124], die PROST-Implementierung nach Gerlach et al. [52], die kraftbalancierte Level-Set-Methode nach Herrmann [64] und die kraftbalancierte CSF-Modell VOF-HF Implementierung von Popinet [123]. Die Konvergenzverläufe der in dieser Arbeit untersuchten Verfahren sind vergleichend in Bild 5.6 a) ge-

genüber gestellt. Dabei weisen Berechnungen mit elementweise konstant approximierten Oberflächenkrümmungen die größte Lösungsgenauigkeit auf. Ursächlich für den Genauigkeitsabfall elementweise linear angenäherter Krümmungen ist die unzureichende Wiederherstellung der Abstandseigenschaft reinitialisierter Level-Set-Funktionen (Abschnitt 3.4.2). Damit weisen elementweise linear und konstant approximierte Krümmungen gleiche Konvergenzordnungen auf, wobei konstante Krümmungswerte im Integral über Grenzflächen genauer sind. Die Lösungsgenauigkeit bei Verwendung des Laplace-Beltrami-Operators ist in diesem Beispiel lediglich bei der feinsten untersuchten Diskretisierung für den Testfall $H = L$ größer als mit expliziter Krümmungsermittlung. Entsprechend ist die Verwendung von Laplace-Beltrami-Operatoren im Bereich der gewählten Diskretisierungen dieses Beispiels nicht von Vorteil. Die Konvergenzverläufe weisen jedoch darauf hin, dass Vorteile bei noch feineren Diskretisierungen bestehen.

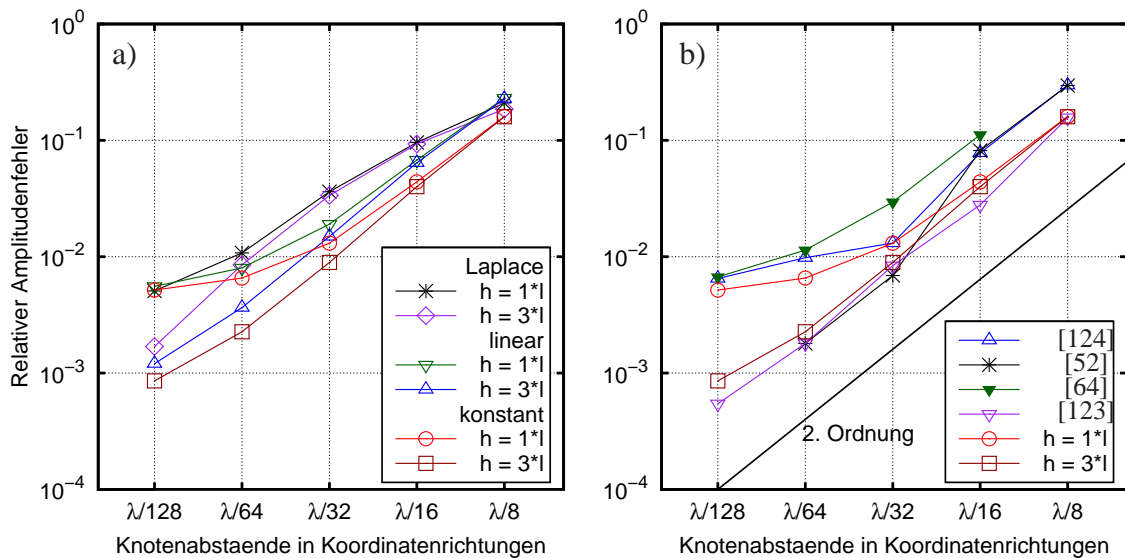


Bild 5.6: Konvergenz des relativen Amplitudenfehlers E_{Amp} für verschiedene Lösungsmethoden.

Die in Bild 5.6 a) dargestellten Konvergenzverläufe zeigen, dass der relative Amplitudenfehler für $H = L$ mit zunehmender Netzfeinheit nicht quadratisch gegen Null, sondern gegen einen unbekannten Fehlerwert konvergiert. Bei einer Gebietshöhe $H = 3L$ hingegen konvergiert der Fehler auch bei feinen Diskretisierungen annähernd mit 2. Ordnung. Dies ist konform zur analytischen Lösung, die für unendlich ausgedehnte Berechnungsgebiete gilt, und bestätigt die in [123] geäußerte Vermutung bezüglich der Gebietshöhe. Demnach sind die untersuchten Testfälle zu unterscheiden und deren Ergebnisse separat mit Literaturwerten zu vergleichen.

Die Ergebnisse aller zu diesem Vergleich herangezogenen Arbeiten, mit Ausnahme von [123], gründen auf dem in Bild 5.4 a) dargestellten quadratischen Berechnungsgebiet. Für diesen Fall sind die hier ermittelten Fehlerwerte mit elementweise konstanten Krümmungen kleiner als die in [124] (außer $\lambda/32$) und [64] angegebenen Werte, siehe Bild 5.6 b). Die Ergebnisse in [52] sind etwas überraschend, da der Konvergenzverlauf signifikante Unterschiede in der Konvergenzrate aufweist. Im Vergleich sind die Fehler für $\lambda/8$, $\lambda/16$ größer als die hier ermittelten und für $\lambda/32$, $\lambda/64$ deutlich kleiner. Für den Testfall $H = 3L$ weisen die Ergebnisse von Popinet [123] im Vergleich eine geringfügig größere Genauigkeit auf. Hinsichtlich der Tatsache, dass im Rahmen dieser Arbeit räumliche Dreiecks- anstatt Viereckelemente verwendet sind, besteht bezüglich der Lösungsgenauigkeit jedoch noch Verbesserungspotential.

5.4 Stationäre Schichtenströmung

Bei diesem Testfall wird die Approximation schwach unstetiger Lösungsverläufe mit dem verwendeten numerischen Lösungsverfahren am Beispiel der stationären Schichtenströmung einer Zwei-Fluid Hagen-Poiseuille-Strömung untersucht. Gegeben ist der in Bild 5.7 dargestellte links- und rechtsseitig offene sowie an Ober- und Unterseite geschlossene Kanal mit den Abmessungen $L = 200$ cm und $H = 100$ cm. Darin fließen zwei nicht mischbare, geschichtete Fluide in den Gebieten Ω_t^1 und Ω_t^2 mit zeitlich konstanter Grenzflächenlage $D = 2/3H$ in horizontaler Richtung. Die inkompressiblen linear-viskosen Fluide weisen mit $\rho_1 = \rho_2 = 1$ g/cm³ identische Dichten auf. Fluid 1 im Gebiet Ω_t^1 besitzt die dynamische Viskosität $\mu_1 = 10$ g/s/cm. Für Fluid 2 im Gebiet Ω_t^2 sind die dynamischen Viskositäten so variiert, dass für Viskositätsverhältnisse $\mu_1/\mu_2 = 1, 10, 100, 1000$ Aussagen über das Lösungsverhalten des vorgestellten Lösungsverfahrens getroffen werden können. Kräfte aus Erdbeschleunigung und Oberflächenspannungseffekten finden keine Berücksichtigung.

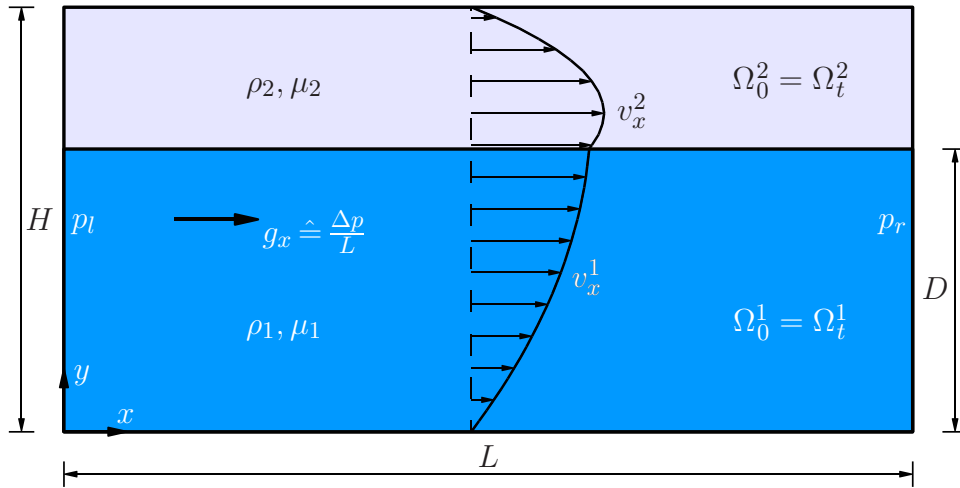


Bild 5.7: Zwei-Fluid Poiseuille-Strömung, System mit Gebietsverteilung.

Die Größe der horizontalen Fließgeschwindigkeit ist mit der Druckdifferenz $\Delta p = (p_l - p_r)$ der links- und rechtsseitig unterschiedlichen Drücke p_l und p_r , mit $p_l > p_r$, der Viskosität der betrachteten Fluide sowie den Geschwindigkeitsrandbedingungen entlang der geschlossenen Kanalseiten bestimmt. Für laminare Strömungen mit Hafttrandbedingungen an Ober- und Unterseite des Kanals sowie den Übergangsbedingungen (2.41) auf der Grenzfläche stellt sich die analytische Lösung für die horizontalen Fluidgeschwindigkeiten zu

$$v_x^1(x, y) = -\frac{\Delta p}{2\mu_1 L} (y^2 - \xi y) \quad \text{für } 0 \leq y \leq D, \quad (5.29)$$

$$v_x^2(x, y) = -\frac{\Delta p}{2\mu_2 L} ((y^2 - H^2) - \xi(y - H)) \quad \text{für } D \leq y \leq H, \quad (5.30)$$

$$\text{mit } \xi = H \cdot \frac{\mu_1(1 - \zeta^2) + \mu_2 \zeta^2}{\mu_1(1 - \zeta) + \mu_2 \zeta} \quad \text{und} \quad 0 < \zeta = \frac{D}{H} < 1$$

ein. Die vertikalen Geschwindigkeiten folgen zu $v_y^1(x, y) = v_y^2(x, y) = 0$.

Die numerischen Berechnungen erfolgen auf regelmäßigen Ortsdiskretisierungen mit in Koordinatenrichtungen äquidistant angeordneten Knoten. Dabei variieren die räumlichen Knotenabstände d_n von $H/2$ als gröbste bis $H/256$ als feinste Diskretisierung. Die Diskretisierung des Berechnungsgebietes mit $d_n = H/32$ cm ist in Bild 5.8 dargestellt. Als antreibende Kraft ist eine Druckdifferenz von $\Delta p = 200$ g/cm/s² gewählt. Diese wird zur Vereinfachung der numerischen Berechnung jedoch durch eine äquivalente Volumenkraftdichte $g_x = \Delta p/L = 1$ g/cm²/s² ersetzt. Neben Hafttrandbedingungen an Ober- und Unterseite des Kanals sind die vertikalen Geschwindigkeiten an rechter und linker sowie der Druck an der rechten Kanalseite zu Null gesetzt. Die Level-Set-Funktion wird als Anfangsbedingung vorgegeben und ist zeitlich konstant. Da die analytische Lösung der stationären Lösung entspricht, sind die Terme der Massenträgheiten im Rahmen der Berechnungen zu Null gesetzt. Entsprechend dienen die oben angegebenen Materialdichten lediglich der Stabilisierung der Druckterme. Erweiterte Ansätze sind für die horizontalen Geschwindigkeiten gewählt, während vertikale Geschwindigkeitsfreiwerte und Druckfreiwerte mit konventionellen Ansätzen approximiert sind. Die Berechnung erfolgt bis zum Erreichen der stationären Lösung mit einer Zeitschrittweite von $\Delta t = 0,1$ s.

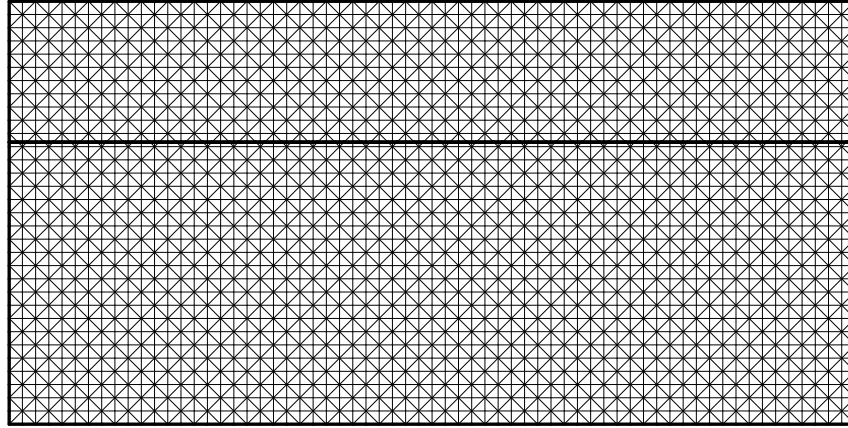


Bild 5.8: Zwei-Fluid Poiseuille-Strömung, Diskretisierung mit $d_n = H/32$ cm.

Mit $v_x^{\text{num}}(x, y)$ als numerischer und $v_x^{\text{ana}}(x, y)$ als analytischer Geschwindigkeitslösung ist der relative Geschwindigkeitsfehler

$$E_{\text{velo}} = \sqrt{\frac{\int_0^H (v_x^{\text{num}}(x, y) - v_x^{\text{ana}}(x, y))^2 dy}{\int_0^H (v_x^{\text{ana}}(x, y))^2 dy}} \quad (5.31)$$

in dieser Arbeit mit den Integralen über den Ausflussrand ($x = 200$ cm) in der L_2 -Norm formuliert und ausgewertet. Die beidseitig der Grenzfläche berechneten Geschwindigkeiten $v_{x,\Sigma}^{1,\text{num}}(x)$ und $v_{x,\Sigma}^{2,\text{num}}(x)$ bei $y = 2/3H$ weisen aufgrund der lediglich im Integral erzwungenen Stetigkeit der Geschwindigkeitslösung einen Sprung $\llbracket v_{x,\Sigma}^{\text{num}}(x) \rrbracket \neq 0$ auf. Die Auswertung dieses Sprunges erfolgt mit dem in der L_2 -Norm formulierten absoluten Grenzflächenfehler

$$E_{\text{jump}} = \sqrt{(v_{x,\Sigma}^{1,\text{num}}(x) - v_{x,\Sigma}^{2,\text{num}}(x))^2} \quad (5.32)$$

ebenfalls am Ausflussrand, wo der Sprung $\llbracket v_{y,\Sigma}^{\text{num}}(x) \rrbracket$ aufgrund der Randbedingungen Null ist.

Nitsche's Methode. Die Berechnungen mit der in Abschnitt 5.2.2 vorgestellten Methode nach Nitsche erfolgen für verschiedene Werte $\vartheta = 1, 10, 100$ des Penalty-Faktors (5.18). Die numerisch berechneten Geschwindigkeitsprofile am Ausflussrand für die untersuchten Viskositätsverhältnisse bei einer Teilung $d_n = H/16$ sind für den Penalty-Faktor $\vartheta = 10$ in Bild 5.9 dargestellt und mit den analytischen Lösungen verglichen.

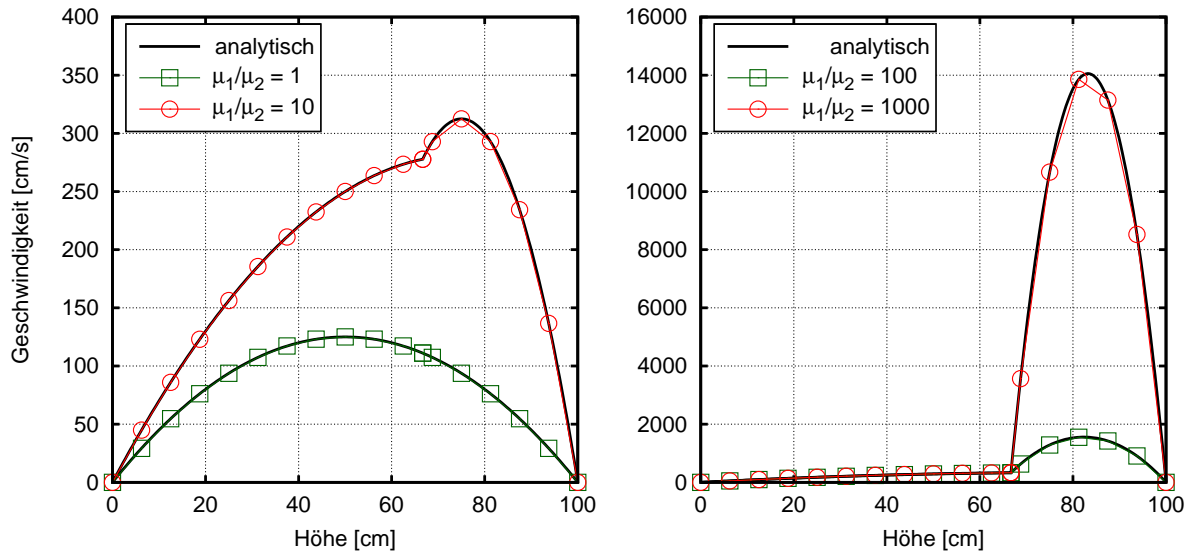


Bild 5.9: Vergleich von analytischer und numerischer Geschwindigkeitslösung, $d_n = H/16$, $\vartheta = 10$.

Die Methodik ist in der Lage, schwach unstetige Lösungsverläufe selbst mit der im Bereich der Unstetigkeiten relativ grob gewählten Diskretisierungsvariante sehr gut zu approximieren. Auch der signifikante Gradientensprung im Geschwindigkeitsprofil bei $\mu_1/\mu_2 = 1000$ wird mit dem Verfahren sehr gut abgebildet. Lediglich in Bereichen mit großen Gradienten (abseits der Grenzfläche) treten deutlichere Abweichungen von der analytischen Lösung auf.

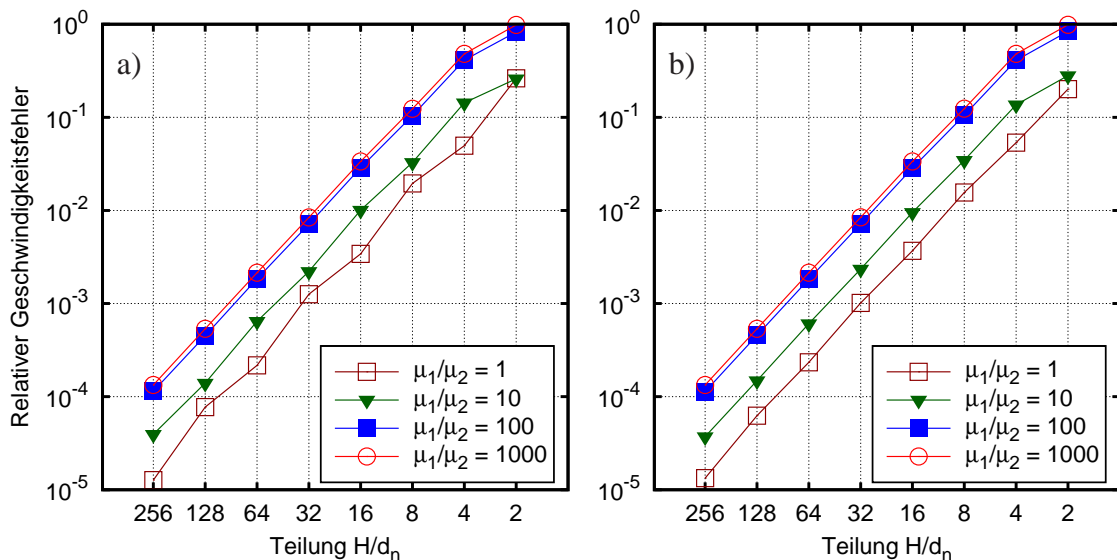


Bild 5.10: Konvergenz des relativen Geschwindigkeitsfehlers am Ausflussrand: a) $\vartheta = 1$, b) $\vartheta = 10$.

Für die Penalty-Faktoren $\vartheta = 1$ und $\vartheta = 10$ ist die Entwicklung des mit (5.31) bestimmten relativen Geschwindigkeitsfehlers für alle Viskositätsverhältnisse in Abhängigkeit von der räum-

lichen Diskretisierungsdichte in Bild 5.10 dargestellt. Die Konvergenzverläufe für $\vartheta = 100$ unterscheiden sich nicht wesentlich von denen für $\vartheta = 10$ und sind nicht gezeigt. Mit steigendem Viskositätsverhältnis nimmt auch der relative Geschwindigkeitsfehler zu. Die Ursache dafür sind größere Geschwindigkeitsgradienten (Bild 5.9). Der relative Geschwindigkeitsfehler konvergiert für die berechneten Viskositätsverhältnisse und für alle verwendeten Penalty-Faktoren mit 2. Ordnung gegen Null. Dabei ist das Konvergenzverhalten bei gleich gewählten Viskositäten in Bild 5.10 a) deutlich oszillierend. Auch der Konvergenzverlauf für $\mu_1/\mu_2 = 10$ zeigt Oszillationen, jedoch geringer ausgeprägt. Bei Verwendung von $\vartheta = 10$ und $\vartheta = 100$ konvergieren die relativen Geschwindigkeitsfehler für alle Viskositätsverhältnisse monoton gegen Null.

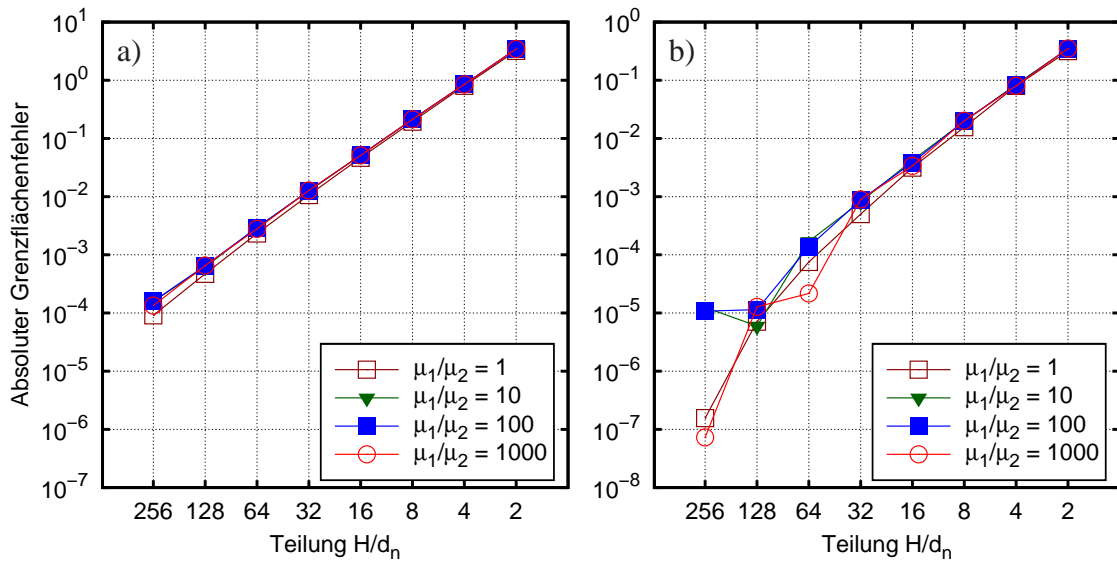


Bild 5.11: Konvergenz des absoluten Grenzflächenfehlers am Ausflussrand: a) $\vartheta = 10$, b) $\vartheta = 100$.

Das Konvergenzverhalten des absoluten Grenzflächenfehlers (5.32) am Ausflussrand ist für die Penalty-Faktoren $\vartheta = 10$ und $\vartheta = 100$ in Bild 5.11 dargestellt. Da das Konvergenzverhalten für $\vartheta = 1$ sich nicht wesentlich von dem für $\vartheta = 10$ unterscheidet, sind die jeweiligen Verläufe hier nicht gezeigt. Die Konvergenzverläufe unterscheiden sich lediglich in der Genauigkeit, die für $\vartheta = 1$ um ca. eine Größenordnung kleiner ist. Für $\vartheta = 10$ in Bild 5.11 a) konvergiert der absolute Grenzflächenfehler monoton mit 2. Ordnung gegen Null. Dabei liegen die Fehlerwerte der untersuchten Viskositätsverhältnisse dicht beieinander. Ähnliches Konvergenzverhalten zeigen die Konvergenzverläufe für $\vartheta = 100$ in Bild 5.11 b) lediglich bei grob diskretisierten Berechnungsgebieten. Mit feiner werdender Diskretisierung stellen sich ausgeprägte Oszillationen in den Konvergenzverläufen ein. Damit ist für die gewählten Viskositätsverhältnisse im Rahmen von Nitsche's Methode und bei unbewegter Grenzfläche ein Penalty-Faktor $1 < \vartheta < 100$ zu wählen.

Örtlich gemischt-hybride Kopplungsmethode. Die Kopplung der Grenzflächenterme erfolgt im Rahmen dieser Arbeit vergleichend zur Kopplungsmethodik nach Nitsche ebenfalls mit der in Abschnitt 5.2.2 vorgestellten örtlich gemischt-hybriden Kopplungsmethode. Dabei wird untersucht, ob die Verwendung eines zusätzlichen Penalty-Terms (5.17) wie in Nitsche's Methode bei unbewegten Grenzflächen notwendig ist. Die Berechnungen erfolgen sowohl ohne Penalty-Term (bzw. mit $\vartheta = 0$) als auch mit einem gewählten Penalty-Faktor $\vartheta = 100$ in (5.18). Die mit der örtlich gemischt-hybriden Kopplungsmethode berechneten Geschwindigkeitsprofile am Ausflussrand sind nicht dargestellt, da sie keine signifikanten Unterschiede zu den mit Nitsche's

Methode ermittelten Profilen in Bild 5.9 aufweisen. Die Entwicklung des mit (5.31) bestimmten relativen Geschwindigkeitsfehlers ist für $\vartheta = 0$ und $\vartheta = 100$ und für alle Viskositätsverhältnisse in Abhängigkeit von der Auflösung der räumlichen Diskretisierung in Bild 5.12 dargestellt.

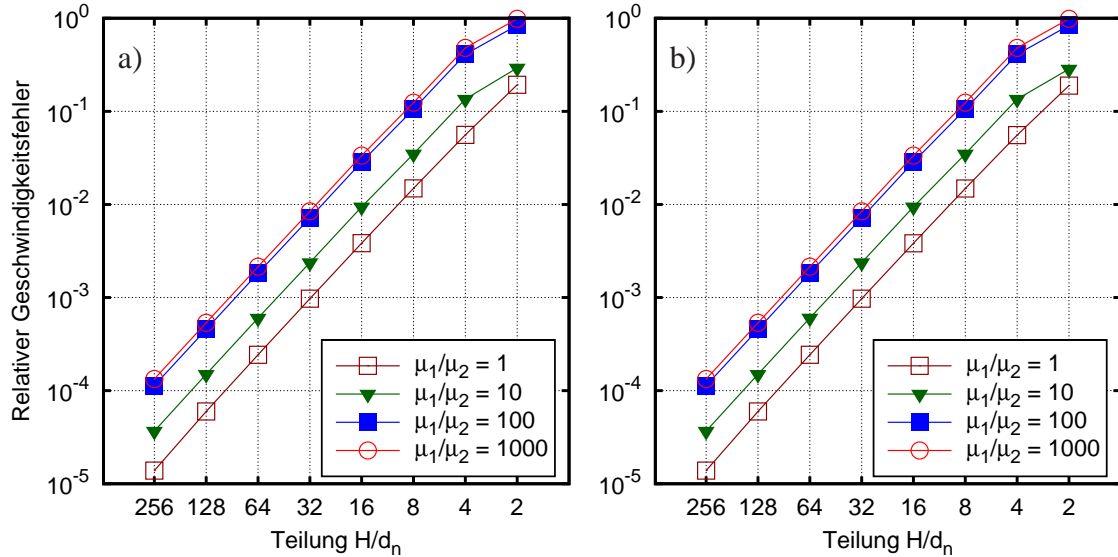


Bild 5.12: Konvergenz des relativen Geschwindigkeitsfehlers am Ausflussrand: a) $\vartheta = 0$, b) $\vartheta = 100$.

Die Konvergenzverläufe mit und ohne Penalty-Term zeigen nur geringe Unterschiede und sind in der gewählten Darstellung nicht zu unterscheiden. Wie schon bei Nitsche's Methode nimmt der relative Geschwindigkeitsfehler mit steigendem Viskositätsverhältnis zu, konvergiert jedoch für alle untersuchten Beispielrechnungen monoton mit 2. Ordnung gegen Null. Das Hinzufügen eines Penalty-Terms hat bei unbewegten Grenzflächen bezüglich des relativen Geschwindigkeitsfehlers keine positiven, aber auch keine negativen Auswirkungen.

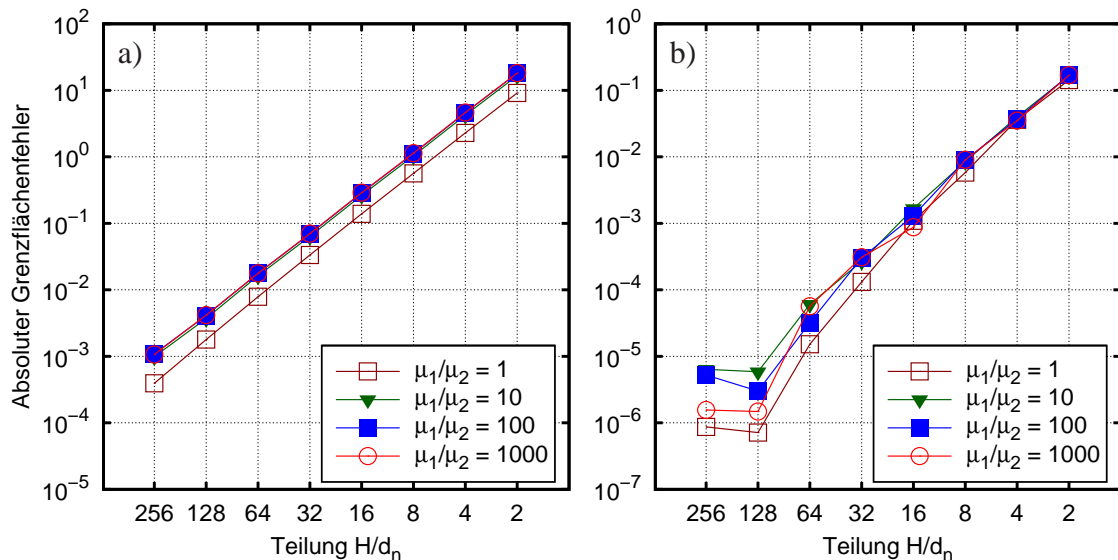


Bild 5.13: Konvergenz des absoluten Grenzflächenfehlers am Ausflussrand: a) $\vartheta = 0$, b) $\vartheta = 100$.

Das Konvergenzverhalten des absoluten Grenzflächenfehlers (5.32) am Ausflussrand ist für die untersuchten Penalty-Faktoren in Bild 5.13 dargestellt. Für $\vartheta = 0$ in Bild 5.13 a) konvergiert der absolute Grenzflächenfehler monoton mit 2. Ordnung gegen Null, wobei die Fehlerwerte der

untersuchten Viskositätsverhältnisse wieder dicht beieinander liegen. Die Konvergenzverläufe für $\vartheta = 100$ in Bild 5.13 b) zeigen auch im Rahmen der örtlich gemischt-hybriden Kopplungsmethode ausgeprägte Oszillationen im Bereich sehr feiner Diskretisierungen. Der Geschwindigkeitssprung auf der Grenzfläche ist jedoch teilweise mehr als zwei Größenordnungen kleiner als bei Berechnungen ohne Penalty-Term. Damit ist die Verwendung des aus Stabilitätsgründen in Nitsche's Methode eingeführten Penalty-Terms im Rahmen der örtlich gemischt-hybriden Kopplungsmethode und bei unbewegten Grenzflächen nicht notwendig. Die Verwendung eines solchen Terms mit sorgfältig gewähltem Penalty-Faktor kann sich jedoch positiv auf die Größe des Lösungssprungs über Grenzflächen hinweg auswirken.

Betragsanreicherungen. Vergleichend zu den diskrete Kopplungsbedingungen einbringenden Verfahren nach Nitsche und mit örtlich gemischt-hybriden Elementen sind im Rahmen dieser Arbeit ebenfalls Betragsanreicherungen untersucht. Dafür sind Ridge-Anreicherungen sowie die Anreicherungsfunktionen der korrigierten XFEM gewählt (Abschnitt 4.2.3). In beiden Fällen sind parasitäre Terme in Blendelementen und damit konvergenzmindernde Effekte vermieden. Die Entwicklung des mit (5.31) bestimmten relativen Geschwindigkeitsfehlers am Ausflussrand ist in Abhängigkeit von der räumlichen Auflösung in Bild 5.14 dargestellt.

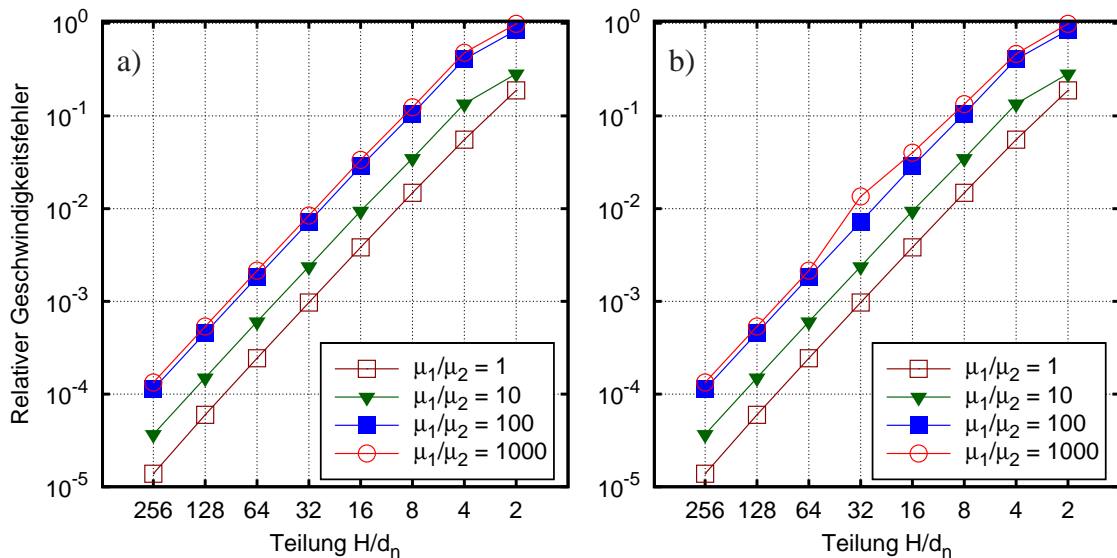


Bild 5.14: Relativer Geschwindigkeitsfehler: a) Ridge-Anreicherung, b) Korrigierte XFEM.

Der relative Geschwindigkeitsfehler bei Verwendung erweiterter Ansätze mit Ridge-Anreicherung (4.18) in Bild 5.14 a) zeigt monotonen Konvergenzverhalten und konvergiert mit 2. Ordnung gegen Null. Die Unterschiede zu den Konvergenzverläufen der diskret Kopplungsbedingungen einbringenden Verfahren sind unwesentlich und in der gewählten Darstellung nicht zu erkennen. Auch die Konvergenzverläufe bei Verwendung der Betragsfunktionen (4.21) im Rahmen der korrigierten XFEM zeigen ähnliches Verhalten und quadratische Konvergenz. Lediglich für das Viskositätsverhältnis $\mu_1/\mu_2 = 1000$ bei räumlichen Knotenabständen von $d_n = H/32$ zeigen sich kleine Abweichungen von der Monotonie der Konvergenzverläufe. Damit sind Betragsanreicherungen zur Erfassung schwach unstetiger Lösungsverläufe und Signumanreicherungen im Rahmen diskret Kopplungsbedingungen einbringender Verfahren hinsichtlich des relativen Variablenfehlers im Berechnungsgebiet gleichwertig.

5.5 Stehende Schwerewelle

Bei diesem Testfall wird die infolge einer vorgegebenen Anfangsauslenkung und mit fortschreitender Zeit abklingende freie Schwingung der Oberflächenpunkte einer stehenden Schwerewelle zwischen zwei Fluiden untersucht. Im Gegensatz zum Testfall der Kapillarwelle in Abschnitt 5.3 ist die Schwingung in diesem Beispiel von einem Gravitationsfeld angetrieben und Effekte aus Oberflächenspannungen sind vernachlässigt. Die Berechnungen erfolgen mit erweiterten Ansätzen für alle Beschreibungsvariablen. Dabei sind die Ansätze sowohl des Druck- als auch des Geschwindigkeitsfeldes mit der Signumfunktion (4.16) angereichert. Die Vernachlässigung von Oberflächenspannungen führt zwar auf schwach unstetige Druckverläufe über Grenzflächen hinweg, Anreicherungen des Druckfeldes mit Betragsfunktionen haben sich jedoch als nicht zielführend erwiesen. Zur Kopplung des Geschwindigkeitsfeldes werden Nitsche's Methode sowie örtlich gemischt-hybride Elemente verwendet. Beide Kopplungsmethoden sind hinsichtlich der zeitlichen Entwicklung der Wellenamplitude bei verschiedenen Reynoldszahlen der Strömung untersucht und mit der analytischen Lösung [162] verglichen.

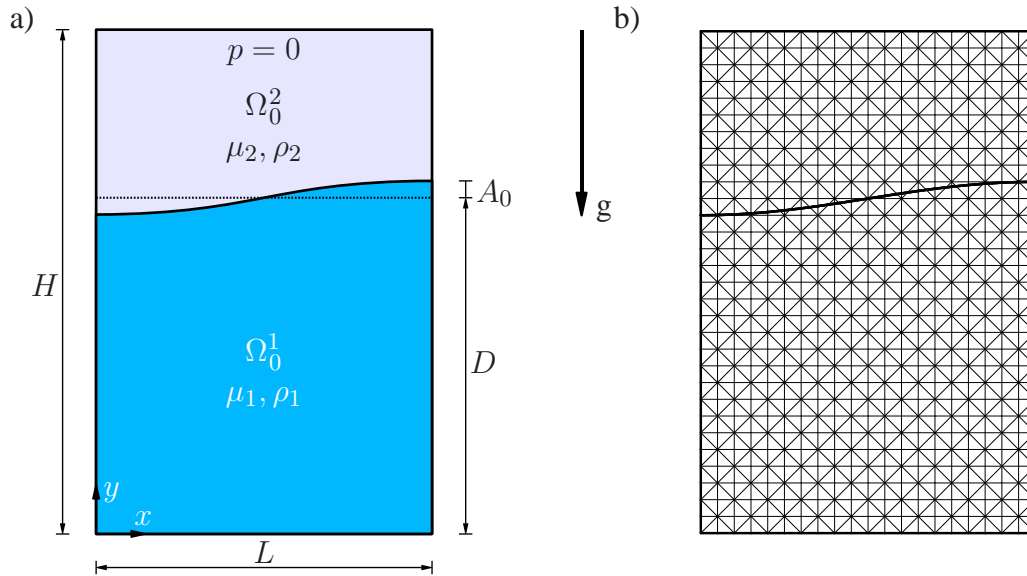


Bild 5.15: Schwerewelle: a) System mit initialer Gebietsverteilung, b) Diskretisierung.

Die Ausgangskonfiguration des Testfalles zum Zeitpunkt $t = 0$ s ist [85] entnommen und in Bild 5.15 a) dargestellt. Sie umfasst einen rechteckigen Behälter mit der Breite $L = 100$ cm und der Höhe $H = 150$ cm, der in zwei Subgebiete Ω_t^1 und Ω_t^2 unterteilt ist. Die nicht mischbaren inkompressiblen linear-viskosen Fluide in den Subgebieten besitzen die Dichten $\rho_1 = 1$ g/cm³ und $\rho_2 = 10^{-3}$ g/cm³. Die dynamische Viskosität des Fluids im Gebiet Ω_t^2 beträgt $\mu_2 = 10^{-1}$ g/s/cm. Fluid 1 im Subgebiet Ω_t^1 besitzt einen Ruhespiegel von $D = 100$ cm und ist zu Beginn der Berechnung sinusförmig um die Ruhelage ausgelenkt. Die aufgrund der konstanten Gravitationsbeschleunigung $g = 100$ cm/s² resultierende Schwingung um die Ruhelage ist für verschiedene Werte der dynamischen Viskosität $\mu_1 = 10, 100, 1000$ g/s/cm untersucht. Als Maß für den Reibungseinfluß auf das Schwingungsverhalten dient die nach [162] mit der Wellengeschwindigkeit \sqrt{gD} definierte Reynoldszahl $Re = \rho_1 D \sqrt{gD} / \mu_1$. An den Behälterwänden und am Behälterboden sind Gleitrandbedingungen angenommen, während entlang der offenen oberen

Behälterseite das Druckniveau $p = 0 \text{ kg/cm/s}^2$ gesetzt ist. Das Berechnungsgebiet ist entsprechend Bild 5.15 b) mit 1200 finiten Raum-Zeit-Elementen diskretisiert, die Zeitschrittweite im Intervall $I_t = (0,40) \text{ s}$ ist zu $\Delta t = 0,1 \text{ s}$ gewählt. Die initiale Gebietsverteilung der Fluide in den jeweiligen Subgebieten ist mit den Gebietsgrenzen und der anfänglichen Grenzflächenposition

$$\eta_0 = D + A_0 \sin(k(x - 50)) \quad (5.33)$$

gegeben. Darin ist $A_0 = D/100$ die Ausgangsamplitude am rechten Behälterrand, $k = 2\pi/\lambda$ die Kreiswellenzahl und $\lambda = 2L$ die Wellenlänge. Für gegenüber dem Ruhespiegel kleine Wellenamplituden geben Wu et al. [162] eine analytische Lösung der linearisierten Navier-Stokes-Gleichungen, die zum Vergleich der Berechnungen in dieser Arbeit herangezogen wird.

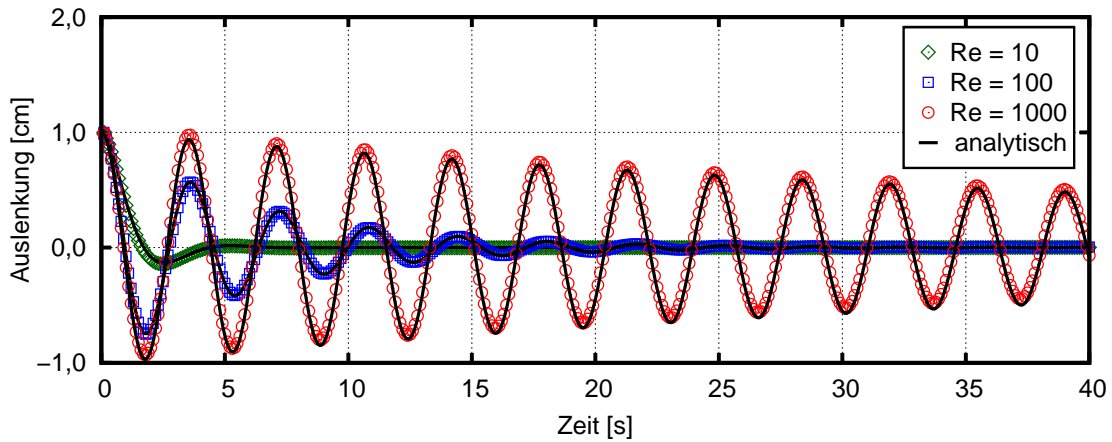


Bild 5.16: Oberflächenauslenkung: Nitsche's Methode unter Verwendung von $\vartheta = 10$.

Bild 5.16 zeigt die zeitliche Entwicklung der Oberflächenauslenkung am rechten Behälterrand im Vergleich mit der analytischen Lösung. Die Kopplung der Fluide über die Grenzfläche ist mit Nitsche's Methode realisiert, wobei der Penalty-Faktor in (5.18) für alle Berechnungen zu $\vartheta = 10$ gewählt ist. Die numerisch ermittelten Werte stimmen für die untersuchten Reynoldszahlen der Strömung sehr gut mit den analytischen Verläufen überein.

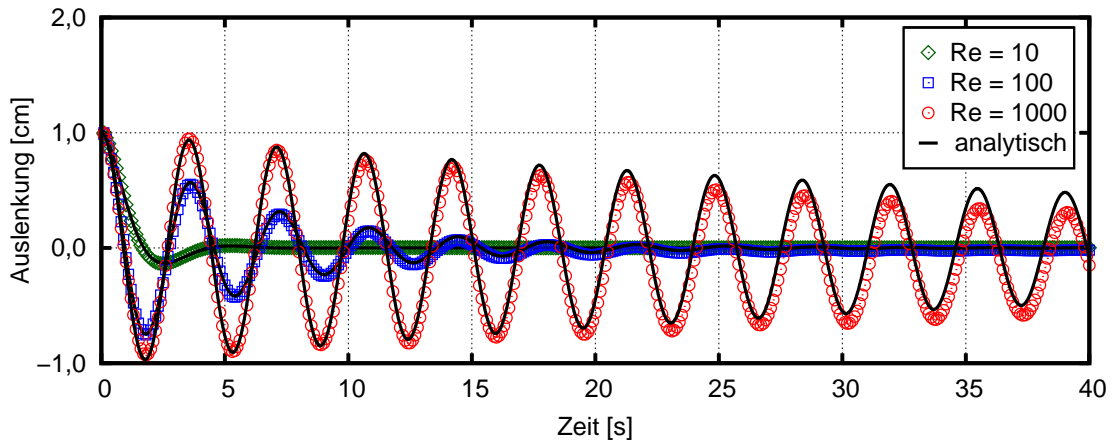


Bild 5.17: Oberflächenauslenkung: Örtlich gemischt-hybride Kopplung ohne Penalty-Term.

Die zeitliche Entwicklung der Oberflächenauslenkung am rechten Behälterrand bei Kopplung der Fluide mit örtlich gemischt-hybriden Elementen ohne zusätzlichen Penalty-Term ist in

Bild 5.17 dargestellt. Für $Re = 10$ und $Re = 100$ stimmen auch hier die Werte der ermittelten Auslenkungen gut mit der analytischen Lösung überein. Der zeitliche Verlauf der Auslenkung bei $Re = 1000$ weist jedoch Abweichungen von der analytischen Lösung auf, wobei die Form der Abweichungen auf das Absinken der Grenzflächenruhelage und damit die unzureichende Erhaltung der Masse über die Grenzfläche hinweg schließen lässt.

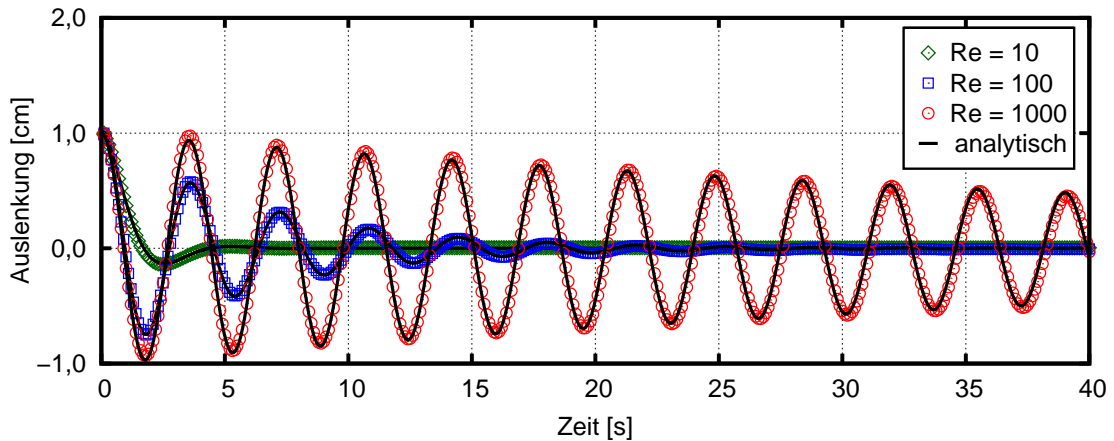


Bild 5.18: Oberflächenauslenkung: Örtlich gemischt-hybride Kopplung mit Penalty-Term.

In Bild 5.18 ist die zeitliche Entwicklung der Oberflächenauslenkung am rechten Behälterrand bei Hinzufügen eines Penalty-Terms (5.17) zur schwachen Form der Oberflächenkopplung mit örtlich gemischt-hybriden Elementen dargestellt. Der Penalty-Faktor in (5.18) ist für alle Berechnungen zu $\vartheta = 10$ gewählt. Die Abweichungen von der analytischen Lösung sind deutlich geringer als bei den Ergebnissen in Bild 5.17 und entsprechend ist das Hinzufügen eines zusätzlichen Terms der Form (5.17) bei örtlich gemischt-hybrider Kopplungsmethodik aus Stabilitätsgründen zwar nicht notwendig, hat jedoch einen positiven Effekt auf die Erhaltung der Masse bei bewegten Grenzflächen.

6. Feststoffe

Granulare Bodenmaterialien können sowohl feststoffähnliches als auch fluidähnliches Verhalten aufweisen. Insbesondere während der initialen Phase einer Hangrutschung geht mindestens ein Teil des Bodenmaterials in einen fluidähnlichen Zustand über, so dass ein Segment des Bodens kinematisch wird und zu rutschen beginnt. Damit ist der Übergang von feststoffähnlichem zu fluidähnlichem Verhalten entscheidend für den Beginn einer Rutschung. Das mechanische Verhalten von Bodenmaterialien ist dabei durch eine Vielzahl unterschiedlicher Parameter beeinflusst. Dazu zählen der Winkel der inneren Reibung, die Kohäsion, die Dichte, die Korngröße und deren Verteilung, der Porenanteil, der Wassergehalt in den Poren, die Temperatur, der Verlauf der Spannungsgeschichte sowie weitere stoffspezifische Einflussfaktoren. Dementsprechend ist es nicht möglich, ein allgemeingültiges Materialgesetz für Böden anzugeben. Dennoch existieren in der Bodenmechanik auf spezielle Bodenarten zugeschnittene Stoffgesetze, die Berechnungen des Vorversagenszustandes bis hin zum Versagen des Bodenmaterials ermöglichen. Dabei stehen jedoch die Dimensionierung von Gründungsbauwerken unter Berücksichtigung von Verformungen und Setzungen des Baugrundes sowie der Nachweis der Stabilität und Tragfähigkeit des Bodens im Vordergrund. Nachversagenszustände von Bodenmaterialien spielen in den Betrachtungen eine untergeordnete Rolle. Entsprechend beruhen die für bodenmechanische Aufgabenstellungen entwickelten Modelle der Kontinuumsmechanik auf der Lagrange'schen Betrachtungsweise, mit der jedoch Nachversagens- und damit Hangrutschungsprozesse nur unzureichend modelliert werden können. Für die einheitliche Modellierung von Vor- und Nachversagenszuständen sind daher alternative Beschreibungsweisen erforderlich. Hier bieten sich Euler'sche Betrachtungsweisen oder ALE-Formulierungen an.

Das folgende Kapitel widmet sich der numerischen Modellierung von Feststoffen in Euler'scher Betrachtung. Dafür ist in Abschnitt 6.1 zunächst die schwache Form der Modellgleichungen elastischer Materialien als Grundlage der Diskretisierung angegeben. Die Wahl der Spannungsansätze im Rahmen gemischt-hybrider Elemente ist diskutiert und die damit zusätzlich notwendige Ermittlung von Spannungsgradienten dargelegt. Eine mögliche Umsetzung der Spannungs- und Spannungsgradientenberechnung ist vorgestellt und in Abschnitt 6.2 am Beispiel einer rotierenden Kreisscheibe verifiziert. Zur Modellierung granularer Materialien ist eine elasto-viskoplastische Formulierung gewählt. Die damit verbundene Erweiterung des Materialmodells ist in Abschnitt 6.3 vorgestellt und für den ebenen Verzerrungszustand konkretisiert. Fluid-Struktur-Interaktionen sind mit der in Abschnitt 6.4 angegebenen Methodik auf Grundlage der gemischt-hybrid formulierten Strukturelemente realisiert. Die Kopplungsmethodik ist am Beispiel einer schwingenden Platte und deren Schwingungsdämpfung durch ein umgebendes viskoses Fluid in Abschnitt 6.5 untersucht, wobei das Materialverhalten der Platte sowohl elastisch als auch elasto-viskoplastisch modelliert ist. Im abschließenden Beispiel in Abschnitt 6.6 ist die Hangumlagerung von Bodenmaterialien unter verschiedenen inneren Reibungswinkeln gezeigt.

6.1 Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung für elastische Materialien

Die stabilisierte, zeitdiskontinuierliche Raum-Zeit-Formulierung der Modellgleichungen elastischer Materialien in Euler'scher Betrachtung für die Raum-Zeit-Scheibe Q_n mit dem Dirichlet-Rand P_n^D und dem Neumann-Rand P_n^N hat die Form

$$\int_{Q_n} \delta \mathbf{v} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{b} \right) dQ + \int_{Q_n} \mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) : \mathbf{T} dQ \quad (6.1a)$$

$$+ \sum_e \int_{Q_{n,e}} \delta \mathbf{T} : \underline{\mathbf{C}}^{-1} : \frac{\rho_0}{\rho} \mathbf{T} dQ - \sum_e \int_{Q_{n,e}} \delta \mathbf{T} : \mathbf{D}(\mathbf{v}) dQ \quad (6.1b)$$

$$+ \int_{\Omega_n} \delta \mathbf{v}(t_n^+) \llbracket \rho \mathbf{v} \rrbracket_n d\Omega \quad (6.1c)$$

$$+ \sum_e \int_{Q_{n,e}} \delta \mathbf{T}(t_n^+) : \underline{\mathbf{C}}^{-1} : \llbracket \frac{\rho_0}{\rho} \mathbf{T} \rrbracket_n d\Omega \quad (6.1d)$$

$$+ \sum_e \int_{Q_{n,e}} \mathbf{v} \cdot \nabla \delta \mathbf{v} \frac{1}{\rho} \tau_{MOM} \left(\mathcal{L}_M(\mathbf{v}) - \rho \mathbf{b} \right) dQ \quad (6.1e)$$

$$- \int_{P_n^D} \delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{t} dP + \int_{P_n^D} \delta \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}) dP \quad (6.1f)$$

$$- \int_{P_n^N} \delta \mathbf{v} \cdot \bar{\mathbf{t}} dP + \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{v}, \delta \mathbf{T}, \delta \mathbf{t} \quad (6.1g)$$

Darin ist in Zeile (6.1a) die schwache Form der Impulsbilanz (2.21) nach Standard-Galerkin-Wichtung und partieller Integration gezeigt. Mit Zeile (6.1b) ist die Ratenformulierung der Materialgleichung (2.35) nach Standard-Galerkin-Wichtung angegeben. Sie ist lediglich in den offenen Gebieten $Q_{n,e}$ der Raum-Zeit-Elemente $e \in \mathcal{E}$ formuliert. Unter Verwendung von (2.46) sind die Sprungterme des zeitdiskontinuierlichen Galerkin-Verfahrens in den Zeilen (6.1c) und (6.1d) angegeben. Sie gewährleisten die Impulserhaltung und den Spannungstransport zwischen benachbarten Zeitscheiben in integraler Form. Zeile (6.1e) zeigt die SUPG-Stabilisierung der schwachen Form mit dem Residuum

$$\mathcal{L}_M(\mathbf{v}) = \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) - \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (6.2)$$

der starken Form (2.21). Die Stabilisierung verhindert unphysikalische numerische Oszillationen bei dominierender Konvektion und bei Wellenausbreitungsphänomenen. Die Ermittlung des elementweise formulierten Stabilisierungsparameters τ_{MOM} ist nachfolgend näher erläutert. Das erste Randintegral in Zeile (6.1f) entsteht bei der partiellen Integration der Impulsbilanz und dient der Bestimmung von Randspannungen auf dem Dirichlet-Rand, die als unabhängige Zustandsgrößen zu ermitteln sind, wenn der zweite Term in Zeile (6.1f) die Dirichlet-Randbedingung (2.39) im Rahmen einer Lagrange-Multiplikator-Formulierung lediglich in schwacher Form erfüllt. Sind eingeprägte Geschwindigkeiten auf dem Dirichlet-Rand direkt als Randbedingungen vorgegeben, verschwinden beide Terme. Auf dem Neumann-Rand eingeprägte Randspannungen sind nach Einsetzen der Neumann-Randbedingung in (2.39) mit dem ersten

Term in Zeile (6.1g) berücksichtigt. Der zweite Term „G.T.“ in Zeile (6.1g) steht für die Grenzflächenterme, die bei Oberflächenkopplung des Feststoffes mit einem anstehenden Medium zu berücksichtigen sind. Deren Umsetzung im Rahmen der Variationsformulierung ist detailliert in Abschnitt 6.4 erläutert.

Die numerische Lösung der Modellgleichungen linear-elastischer Feststoffe in Euler'scher Betrachtung im Raum-Zeit-Gebiet Q erfolgt mit sequentieller Auswertung von (6.1) für alle Raum-Zeit-Scheiben Q_0, \dots, Q_{N-1} und beginnt nach (2.38) mit der Anfangsbedingung

$$\mathbf{v}(t_0^-) = \mathbf{v}_0 \quad \text{in} \quad \Omega_0 \quad . \quad (6.3)$$

Beschreibungsvariable der Formulierung sind die Geschwindigkeiten \mathbf{v} , die Spannungen \mathbf{T} , die Dichte ρ und die Randspannungen \mathbf{t} , wenn Dirichlet-Randbedingungen lediglich in schwacher Form eingebracht sind. Da der elastische Festkörper in der Referenzkonfiguration per Definition spannungsfrei ist, sind die Spannungen zu Beginn der Berechnung Null. Die Anfangsbedingung der Dichte ist in (6.17) für die in Abschnitt 6.1.4 vorgestellte Vorgehensweise zur Berücksichtigung veränderlicher Dichte gegeben. Innerhalb einer Raum-Zeit-Scheibe sind die Geschwindigkeiten C_0 -stetig und an den Übergängen benachbarter Zeitscheiben C_0 -unstetig approximiert. Auch Spannungen und Dichte sind an den Übergängen benachbarter Zeitscheiben C_0 -unstetig angenähert, zur räumlichen Approximation sind jedoch spezielle Algorithmen eingesetzt, die sowohl räumlich C_0 -unstetige als auch räumlich C_0 -stetige Ansätze zur Approximation der Beschreibungsvariablen verwenden. Die Geometrie der Elemente ist mit den verwendeten isoparametrischen 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelementen linear angenähert.

Stabilisierung. Die Anwendung des Bubnov-Galerkin-Verfahrens bei der numerischen Lösung von Aufgabenstellungen mit dominierender Konvektion oder bei Wellenausbreitungsphänomenen führt zu unphysikalischen Oszillationen der Lösung in Raum und Zeit, da der richtungsabhängige Informationsfluss vom Verfahren nicht berücksichtigt ist. Diese richtungsabhängige Informationsausbreitung fließt bei der numerischen Berechnung elastischer Materialien mit dem Stabilisierungsterm in Zeile (6.1e) in das Verfahren ein. Die Größe des stabilisierenden Terms an der schwachen Formulierung (6.1) ist dabei mit dem Stabilisierungsparameter τ_{MOM} bestimmt, der im Rahmen dieser Arbeit zu

$$\tau_{MOM} = \left(\left(\frac{2}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{2 \|\mathbf{v}_{rel}\|}{h} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (6.4)$$

gewählt ist. Die Terme in (6.4) zeigen die Abhängigkeit des Stabilisierungsparameters vom dominierenden Differentialoperator. Im Grenzfall der Konvektionsdominanz übt die lokale Elementlänge h größeren Einfluss auf τ_{MOM} aus, während bei ausgeprägt instationären Phänomenen die Zeitscheibendicke Δt die Größe des Stabilisierungsparameters dominiert. Als lokales Längenmaß h ist der Durchmesser eines Kreises gewählt, dessen Flächeninhalt der doppelten zeitgemittelten Elementfläche entspricht. Die L_2 -Norm des mittleren Geschwindigkeitsvektors \mathbf{v}_{rel} bezüglich der Netzgeschwindigkeit ist hier anstelle der von Hübner in [71] im Rahmen der Berechnung elastischer Festkörper in Lagrange'scher Betrachtung verwendeten Kompressionswellengeschwindigkeit als Maß für die konvektive Geschwindigkeit im Element gewählt. Mit verschwindenden Elementabmessungen bei feiner werdender Diskretisierung strebt auch der Stabilisierungsparameter gegen Null.

6.1.1 Ablösen der Spannungsfreiwerte

Nach elementweiser Auswertung der schwachen Form (6.1) folgen die diskreten Gleichungen des numerischen Verfahrens. Mit Anordnung der Geschwindigkeitsfreiwerte im Vektor $\hat{\mathbf{v}}$ und der Spannungsfreiwerte im Vektor $\hat{\mathbf{T}}$ folgt die Matrix-Vektor-Schreibweise der Bestimmungsgleichungen auf Elementebene,

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{M}} & \hat{\mathbf{H}} \\ -\hat{\mathbf{H}}^T & \hat{\mathbf{F}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_n \\ \hat{\mathbf{T}}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{f}} + \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{v}}_{n-1} \\ \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{T}}_{n-1} \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

Aufgrund der zeitdiskontinuierlich formulierten Spannungsansätze des Raum-Zeit-Verfahrens ist das sofortige Ablösen der Spannungsfreiwerte möglich, auch bei Verwendung von Spannungsraten. Die nach den Spannungsfreiwerten aufgelöste zweite Gleichung von (6.5),

$$\hat{\mathbf{T}}_n = \hat{\mathbf{F}}^{-1} \hat{\mathbf{H}}^T \hat{\mathbf{v}}_n + \hat{\mathbf{F}}^{-1} \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{T}}_{n-1} \quad , \quad (6.6)$$

führt nach Einsetzen in die erste Gleichung auf die Elementmatrizen

$$\hat{\mathbf{K}} \hat{\mathbf{v}}_n = \hat{\mathbf{b}} \quad . \quad (6.7)$$

Darin ist die Elementkoeffizientenmatrix mit

$$\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{M}} + \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{F}}^{-1} \hat{\mathbf{H}}^T \quad (6.8)$$

und die rechte Seite mit

$$\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{f}} + \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{v}}_{n-1} - \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{F}}^{-1} \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{T}}_{n-1} \quad (6.9)$$

festgelegt. Entsprechend verbleiben auf Systemebene lediglich Bestimmungsgleichungen für die Geschwindigkeiten. Die Berechnung der Spannungsfreiwerte auf Elementebene erfolgt mit Auswertung von (6.6) in einer Nachlaufrechnung.

Gemischt-hybride Elemente besitzen gegenüber rein gemischten Formulierungen den Vorteil, dass weniger Freiwerte im Gesamtgleichungssystem auftreten, mit entsprechend geringeren Rechenzeiten. Nachteilig hingegen ist die notwendige elementweise Invertierung der Nachgiebigkeitsmatrizen $\hat{\mathbf{F}}$ in (6.8) und (6.9) sowie die elementweise Ermittlung der Spannungsfreiwerte in entsprechenden Nachlaufrechnungen (6.6). Dafür sind die Nachgiebigkeitsmatrizen entweder nochmalig zu invertieren oder nach Invertierung beim Aufbau der Elementmatrizen vorrätig zu halten. Die ermittelten Spannungen sind über räumliche Elementkanten C_0 -unstetig. Ihre Kontinuität ist jedoch von der diskretisierten Impulsgleichung (6.1a) in schwacher Form erzwungen. Damit ist die gemischt-hybride Formulierung in der gewählten Euler'schen Betrachtungsweise problematisch für die Ermittlung der materiellen Zeitableitung der Truesdell-Rate, da deren konvektive Anteile mit den lediglich auf Elementebene ermittelten Spannungsverläufen nicht adäquat erfasst werden können. Ein möglicher Ansatz zu ihrer Erfassung ist in Abschnitt 6.1.3 vorgestellt.

6.1.2 Wahl der Spannungsansätze

Die Truesdell-Rate (2.34) beinhaltet die materielle Zeitableitung und damit erste Ableitungen der Cauchy-Spannungen in Raum und Zeit. Da die gemischt-hybride Elementformulierung jedoch keine adäquate elementübergreifende Erfassung konvektiver Spannungsanteile zulässt, werden diese bei der Wahl der Spannungsansätze zunächst vernachlässigt. Damit sind lediglich erste Ableitungen in der Zeit zu berücksichtigen. Des Weiteren sind die Spannungsansätze in der hier gewählten Geschwindigkeits-Spannungs-Formulierung nicht unabhängig vom Geschwindigkeitsansatz zu wählen, um eindeutige und stabile Lösungen ohne Locking-Effekte zu gewährleisten. Nach Abzug der möglichen Starrkörperbewegungen sind im hier verwendeten 6-Knoten-Raum-Zeit-Prismenelement mindestens 3 Spannungsfreiwerte zu wählen, siehe [71]. Bei konstant im Raum und linear in der Zeit gewählten Spannungsansätzen folgen insgesamt 6 Spannungsfreiwerte für die im Rahmen zweidimensionaler Aufgabenstellungen verbleibenden Spannungskomponenten,

$$\begin{aligned} T_e^{11}(\tau) &= \frac{1}{2} (1 - \tau) \hat{T}_n^{11} + \frac{1}{2} (1 + \tau) \hat{T}_{n+1}^{11} \quad , \\ T_e^{22}(\tau) &= \frac{1}{2} (1 - \tau) \hat{T}_n^{22} + \frac{1}{2} (1 + \tau) \hat{T}_{n+1}^{22} \quad , \\ T_e^{12}(\tau) &= \frac{1}{2} (1 - \tau) \hat{T}_n^{12} + \frac{1}{2} (1 + \tau) \hat{T}_{n+1}^{12} \quad . \end{aligned} \tag{6.10}$$

Da die elementlokalen Spannungen (gekennzeichnet mit dem Index e) lediglich von der lokalen Zeitkoordinate τ abhängen, entfällt die Transformation der lokalen Spannungskomponenten ins globale räumliche Koordinatensystem. Die Ermittlung globaler Spannungen zu ausgesuchten Zeitpunkten t , $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ einer Raum-Zeit-Scheibe erfolgt mit Gleichung (2.49). Mit den sechs Freiwerten der Ansätze (6.10) ergibt sich eine quadratische Nachgiebigkeitsmatrix vom Rang sechs, die aufgrund der mit der Spannung gewichteten Ratenformulierung unsymmetrisch ist. Zur Approximation der Spannungen ist ebenso die Verwendung räumlich linearer Ansätze möglich. Testrechnungen mit diesen Ansätzen haben jedoch gezeigt, dass bezüglich der Genauigkeit keine Vorteile bestehen und der numerische Aufwand lediglich größer ist.

6.1.3 Ermittlung von Spannungsgradienten

Die Truesdell-Rate der Cauchy-Spannungen setzt sich aus der materiellen Zeitableitung

$$\dot{\mathbf{T}} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{T} \tag{6.11}$$

und gemäß (2.31) und (2.34) aus weiteren Ratenanteilen ohne Spannungsableitung zusammen. Da die Approximation der Spannungen mit den räumlich konstanten und in der Zeit linearen Polynomansätzen (6.10) erfolgt, ist der Spannungsgradient im konvektiven Anteil der materiellen Zeitableitung der Truesdell-Rate jedoch nicht berücksichtigt. Dies ist zunächst konform mit der gemischt-hybriden Elementformulierung, deren kantenunstetige Spannungsverläufe die geeignete Erfassung globaler Spannungsgradienten erschweren bzw. verhindern, entspricht jedoch nicht der Physik der zugrunde liegenden Euler'schen Betrachtung.

Im Rahmen dieser Arbeit erfolgt zusätzlich zur Ermittlung globaler Geschwindigkeits- und lokaler Spannungsfreiwerte die Approximation globaler Spannungen \mathbf{T}_{glob} während des Iterationsprozesses. Dafür werden die aus der Geschwindigkeitslösung ermittelten Elementspannungen jedes Iterationsschrittes verwendet, um daraus Knotenwerte der Spannungen zu approximieren, die den Spannungszustand mit räumlich linearen Elementansätzen \mathbf{C}_0 -stetig annähern. Die so genäherten globalen Spannungen dienen der Ermittlung von Spannungsgradienten, die im nachfolgenden Iterationsschritt als Teil der konvektiven Zeitableitung auf der rechten Seite der schwachen Form (6.1) angesetzt sind. Damit ist der erste Term von (6.1b) mit

$$+ \sum_e \int_{Q_{n,e}} \delta \mathbf{T} : \underline{\mathbf{C}}^{-1} : \frac{\rho_0}{\rho} \left(\mathbf{T} - \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{T} \right) dQ + \int_{Q_n} \delta \mathbf{T} : \underline{\mathbf{C}}^{-1} : \frac{\rho_0}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{T}_{\text{glob}} dQ \quad (6.12)$$

umgeformt, wobei der erste Term in (6.12) die Spannungsraten der verwendeten Spannungsansätze (der konvektive Anteil ist nicht erfasst) enthält. Zu beachten ist, dass die Lösung so lange auszuiterieren ist, bis auch die globalen Spannungen die gewählte Fehlerschranke eines geeigneten Fehlermaßes unterschreiten.

Zur Näherung der globalen Spannungsknotenwerte bieten sich die in Abschnitt 3.4.1 vorgestellten Wiederherstellungsverfahren an. Dabei ist jedoch zu beachten, dass aus den Spannungsnachlaufrechnungen lediglich elementweise räumlich konstante Spannungswerte folgen. Entsprechend sind lediglich L^2 -Projektionen oder ZZ-PR-Verfahren geeignet. Aufgrund der Robustheit, der numerischen Effizienz und der guten Ergebnisse der Untersuchungen in Abschnitt 3.4.2 ist im Rahmen dieser Arbeit die ZZ-PR-Wiederherstellung mit linearen Ansätzen zur Näherung der Spannungsknotenwerte gewählt. Dafür ist an den jeweiligen Knoten der aktuellen Raum-Zeit-Scheibe und nach jedem Iterationsschritt eine symmetrische Matrix vom Rang drei zu invertieren. Bei Berechnung auf unbewegten Netzen ergibt sich jedoch die Möglichkeit, die Invertierung lediglich einmal zu Beginn der Berechnung durchzuführen und die jeweiligen Matrixwerte am Knoten vorzuhalten.

6.1.4 Erfassung veränderlicher Dichte

Die Erfassung der Dichteänderung elastischer Materialien erfolgt in der Lagrange'schen Betrachtungsweise mit der lokalen Form der Massebilanz (2.16). In Euler'scher Betrachtung jedoch ist der Deformationsgradiententensor nicht gegeben. Dafür besteht die Möglichkeit, die Determinante des Deformationsgradiententensors mit der Volumendehnung ε_V auszudrücken, $\det \mathbf{F} = 1 + \varepsilon_V$. Nach Umstellen von (2.16) folgt

$$\rho = \rho_0 \frac{1}{1 + \varepsilon_V} \quad (6.13)$$

Dabei ist zu beachten, dass ρ_0 die Dichte einer spannungs- und volumendehnungsfreien Konfiguration ist. Unter Annahme kleiner Verzerrungen entspricht die Volumendehnung der Spur des Verzerrungstensors und ist damit unter Verwendung des Kompressionsmoduls K als Funktion des Druckes p^S (negativer hydrostatischer Anteil des Spannungstensors) definiert,

$$\varepsilon_V = -\frac{p^S}{K} \quad (6.14)$$

Ähnlich den Zustandsgleichungen bei kompressiblen Fluiden lässt sich damit die aktuelle Dichte temperaturunabhängiger elastischer Materialien unter kleinen elastischen Verzerrungen aus dem aktuellen Druck errechnen. Im Allgemeinen gilt Zusammenhang (6.14) bei großen elastischen Verzerrungen oder bei Berücksichtigung plastischer Verzerrungen jedoch nicht.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Dichte mit der Kontinuitätsgleichung (2.17) ermittelt. Dabei besteht die Möglichkeit, die Kontinuitätsgleichung in schwacher Form mit der in jedem Iterationsschritt bestimmten Geschwindigkeitslösung in einem zusätzlichen globalen Gleichungssystem zu lösen. In dieser Arbeit ist jedoch eine alternative Vorgehensweise gewählt. Ähnlich der Spannungsberechnung wird die Kontinuitätsgleichung für jedes Element lediglich lokal auf Elementebene gelöst. Dafür finden die räumlich konstanten und in der Zeit linearen Ansätze

$$\rho_e(\tau) = \frac{1}{2}(1 - \tau) \hat{\rho}_n + \frac{1}{2}(1 + \tau) \hat{\rho}_{n+1} \quad (6.15)$$

für die Elementdichte ρ_e Verwendung. Mit (6.15) ist jedoch der konvektive Anteil der Kontinuitätsgleichung nicht erfasst. Dafür werden, wie schon bei der Ermittlung der Spannungen, aus den lokalen Elementwerten der Dichte globale Werte ρ_{glob} an den Knoten des Berechnungsnetzes approximiert, die die Dichte mit räumlich linearen Elementansätzen C_0 -stetig annähern. Die so approximierten globalen Werte der Dichte dienen der Ermittlung von Dichtegradienten. Diese werden anschließend als Teil der konvektiven Zeitableitung auf der rechten Seite der schwachen Form der Kontinuitätsgleichung angesetzt. Damit hat die raum- und zeitdiskontinuierliche Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung der Kontinuitätsgleichung für die Raum-Zeit-Scheibe $Q_n = \Omega_t \times I_n$ die Form

$$\sum_e \int_{Q_{n,e}} \delta \rho \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dQ + \int_{Q_n} \delta \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{\text{glob}} dQ \quad (6.16a)$$

$$+ \sum_e \int_{\Omega_{n,e}} \delta \rho(t_n^+) [[\rho]]_n d\Omega = 0 \quad \forall \delta \rho \quad . \quad (6.16b)$$

Zeile (6.16a) zeigt die schwache Form der Kontinuitätsgleichung (2.17) nach Standard-Galerkin-Wichtung. Darin ist ρ die mit (6.15) angenäherte Elementdichte und ρ_{glob} der daraus ermittelte globale Wert der Dichte. Der Sprungterm des zeitdiskontinuierlichen Galerkin-Verfahrens in der Zeile (6.16b) ist mit der Stetigkeitsbedingung (2.46) formuliert und gewährleistet die Massenerhaltung zwischen benachbarten Zeitscheiben in integraler Form. Die numerische Lösung der Kontinuitätsgleichung in der Raum-Zeit-Scheibe Q_n erfolgt nach jedem Iterationsschritt der Impulsbilanz so lange abwechselnd mit der Ermittlung von ρ_{glob} , bis lokale und globale Dichtewerte die gewählte Fehlerschranke eines geeigneten Fehlermaßes unterschreiten. Ausgangslösung der Berechnung ist das vorgegebene, elementweise konstante Dichtefeld ρ_0 ,

$$\rho(t_0^-) = \rho_0 \quad \text{in} \quad \Omega_0 \quad , \quad (6.17)$$

sowie ein gegebenes oder daraus approximiertes global C_0 -stetiges Dichtefeld. Auch die Ermittlung der globalen Dichtelösung ρ_{glob} erfolgt aufgrund der bereits genannten Vorteile gegenüber L^2 -Projektionen und aus algorithmischen Gründen mit ZZ-PR-Wiederherstellung.

6.1.5 Lösungsstrategie für die gekoppelten Strukturgleichungen

Die Lösung der diskretisierten Modellgleichungen kompressibler Feststoffe in Euler'scher Betrachtung umfasst die Ermittlung aktueller Geschwindigkeiten, Spannungen und Dichten. Während die aktuellen Geschwindigkeiten mit der Impulsgleichung (2.21) von allen Bestimmungsvariablen abhängen, sind die Spannungsraten in (2.35) von den räumlichen Geschwindigkeitsableitungen und dem Verhältnis von aktueller zu Ausgangsdichte bestimmt. Zur Ermittlung der aktuellen Dichte ist mit (2.17) lediglich das Geschwindigkeitsfeld maßgebend. Damit sind die Feststoffmodellgleichungen stark miteinander gekoppelt, wodurch die numerische Lösung der Gleichungen geeignete und dem ausgeprägt nichtlinearen Systemverhalten angepasste Lösungsstrategien erfordert. Aufgrund der im Rahmen dieser Arbeit elementweise räumlich konstant gewählten Spannungs- und Dichteansätze und der materiellen Zeitableitungen beider Felder sind während des Iterationsprozesses zusätzlich die jeweiligen globalen Spannungs- und Dichtefelder zur Approximation der entsprechenden Gradienten zu ermitteln. Die algorithmische Umsetzung der im Rahmen einer äußeren Picard-Iteration mit inneren Iterationsschleifen voneinander entkoppelt gelösten Teilaufgaben ist in Bild 6.1 dargestellt.

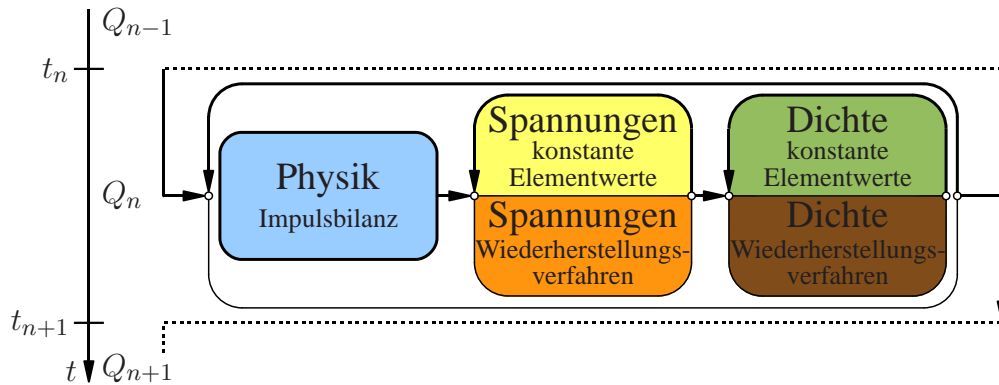


Bild 6.1: Picard-Iterationsschema zur Lösung der gekoppelten nichtlinearen Strukturgleichungen.

Innerhalb des m -ten Picard-Iterationsschrittes der Raum-Zeit-Scheibe Q_n erfolgt zunächst die Lösung des linearisierten Systems der diskretisierten physikalischen Modellgleichungen (6.1). Die aus der diskretisierten Kontinuitätsgleichung des $(m - 1)$ -ten Iterationsschrittes ermittelte Dichtelösung dient dabei dem Aufbau der Elementmassen- und -flexibilitätsmatrizen sowie der rechten Seite des Gleichungssystems. Die Spannungsfreiwerte werden aufgrund der gemischt-hybrid formulierten Elemente abgelöst, so dass lediglich Geschwindigkeitsfreiwerte auf Systemebene verbleiben. Mit der so approximierten Geschwindigkeitslösung erfolgt dann in einer Nachlaufrechnung die Ermittlung der Elementspannungen, um daraus Spannungsknotenwerte zu interpolieren, die den Spannungszustand mit räumlich linearen Elementansätzen C_0 -stetig annähern und der Berechnung von Spannungsgradienten dienen. Beide Lösungen werden im Rahmen einer inneren Iterationsschleife so lange ausiteriert, bis lokale und globale Spannungen die gewählte Fehlerschranke eines geeigneten Fehlermaßes unterschreiten. Ähnlich wird bei der Ermittlung von lokalen und globalen Dichten verfahren, bis beide Lösungen gegeneinander ausiteriert sind. Nach jeder äußeren Picard-Iteration wird der Iterationsfortschritt mit entsprechenden Abbruchbedingungen überprüft. Bei Nichterfüllung ist neu zu iterieren. Mit hinreichender Konvergenz sind alle nichtlinearen Einflüsse berücksichtigt, so dass die Berechnung der folgenden Zeitscheibe beginnen kann.

6.2 Rotierende Kreisscheibe

Bei diesem Testfall wird das Konvergenzverhalten der in Abschnitt 6.1 vorgestellten gemischt-hybriden Raum-Zeit-Finite-Element-Formulierung für elastische Festkörper in Euler'scher Betrachtungsweise untersucht. Dafür ist die in Bild 6.2 a) dargestellte Kreisscheibe gewählt, die in Dickenrichtung unendlich ausgedehnt ist und mit konstanter Winkelgeschwindigkeit ω um den Scheibenmittelpunkt rotiert. Der Außenradius der Scheibe ist mit R bezeichnet.

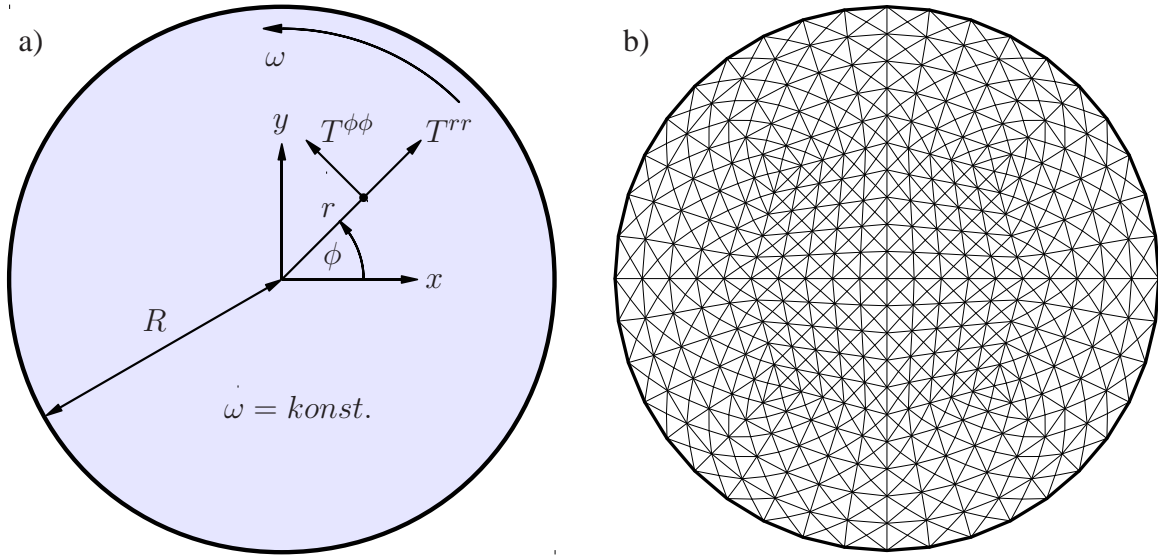


Bild 6.2: Rotierende Kreisscheibe: a) System, b) Diskretisierung.

Aufgrund von Zentrifugalbeschleunigungen und unter Annahme von Rotationssymmetrie und linear-elastischem Materialverhalten stellt sich in der Scheibe ein Spannungszustand ein, für den eine analytische Lösung existiert. Die Modellgleichungen des deformierbaren Kontinuums in Zylinderkoordinaten vereinfachen sich für den ebenen Verzerrungszustand zu einer inhomogenen Differentialgleichung vom Euler'schen Typ für die Verschiebungen u_r in Radialrichtung,

$$u_{r,rr} + \frac{1}{r}u_{r,r} - \frac{1}{r^2}u_r + \frac{\rho b_r}{\lambda + 2\mu} = 0 \quad . \quad (6.18)$$

Darin ist ρ die Dichte des Materials, $0 \leq r \leq R$ ist die Entfernung vom Kreismittelpunkt in radialer Richtung, $b_r = \omega^2 r$ ist die massenbezogene Beschleunigung (Zentrifugalbeschleunigung) und λ sowie μ sind die Lamé-Konstanten des Saint-Venant-Kirchhoff-Materials (2.29). Entsprechend sind die Spannungen T^{rr} , $T^{\phi\phi}$ und $T^{r\phi}$ über das Materialgesetz und mit den kinematischen Verzerrungs-Verschiebungsbeziehungen $\varepsilon^{rr} = u_{r,r}$, $\varepsilon^{\phi\phi} = \frac{1}{r}u_r$ und $\varepsilon^{r\phi} = 0$ direkt mit den Verschiebungen verknüpft. Für variierende Dichten mit linear über den Radius angesetztem Dichteverlauf folgt mit $\rho^0 = \rho(r=0)$ und $\rho^R = \rho(r=R)$ die Funktion für die Dichte $\rho(r) = \frac{\rho^R - \rho^0}{R} \cdot r + \rho^0$. Mit der Forderung nach nichtsingulären Verschiebungen im Kreisscheibengebiet verbleibt lediglich eine Integrationskonstante, die aus geeigneten Randbedingungen zu ermitteln ist. Da die Beschreibung physikalischer Vorgänge in Euler'scher Betrachtungsweise auf zeitlich konstanten Beobachtungsgebieten erfolgt, ist es zweckmäßig, dafür die Randbe-

dingung $u_r(R) = 0$ vorzugeben. Damit folgt die analytische Spannungslösung

$$\begin{aligned}
 T^{rr}(r) &= \frac{\omega^2}{60(\lambda + 2\mu)} \left((\lambda + \mu) (7\rho^0 + 8\rho^R) R^2 \right. \\
 &\quad \left. - 15(2\lambda + 3\mu)\rho^0 r^2 - 4(5\lambda + 8\mu) \frac{\rho^R - \rho^0}{R} r^3 \right) , \\
 T^{\phi\phi}(r) &= \frac{\omega^2}{60(\lambda + 2\mu)} \left((\lambda + \mu) (7\rho^0 + 8\rho^R) R^2 \right. \\
 &\quad \left. - 15(2\lambda + \mu)\rho^0 r^2 - 4(5\lambda + 2\mu) \frac{\rho^R - \rho^0}{R} r^3 \right) , \\
 T^{r\phi}(r) &= 0 .
 \end{aligned} \tag{6.19}$$

Die Spannungsfreiwerte der schwachen Form (6.1) sind bezüglich kartesischer Koordinaten formuliert, während die analytisch ermittelten Spannungen (6.19) in Zylinderkoordinaten vorliegen. Zum Vergleich beider Lösungen werden die analytisch bestimmten Spannungen ins kartesische Koordinatensystem transformiert. Mit dem Radiusvektor $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ ist die massenbezogene Beschleunigung für Zentrifugalbeschleunigungen mit $\mathbf{b}(\mathbf{x}) = \omega^2 \cdot \mathbf{r}(\mathbf{x})$ gegeben. Der Außenradius des Berechnungsgebietes ist zu $R = 10$ m und die Winkelgeschwindigkeit zu $\omega = 0,1$ rad/s gewählt. Die Lamé-Konstanten sind zu $\lambda = 4 \cdot 10^7$ kg/m/s² und $\mu = 6 \cdot 10^7$ kg/m/s² gesetzt. Damit folgt der Elastizitätsmodul $E = 1,44 \cdot 10^8$ kg/m/s² und die Querdehnzahl $\nu = 0,2$. Die Dichte verläuft linear in radialer Richtung und fällt von $\rho^0 = 2,0 \cdot 10^3$ kg/m³ im Mittelpunkt der Scheibe auf $\rho^R = 1,0 \cdot 10^3$ kg/m³ am Rand der Scheibe ab. Sie ist als zeitlich konstant angenommen und damit für jeden Punkt des Berechnungsgebietes bekannt.

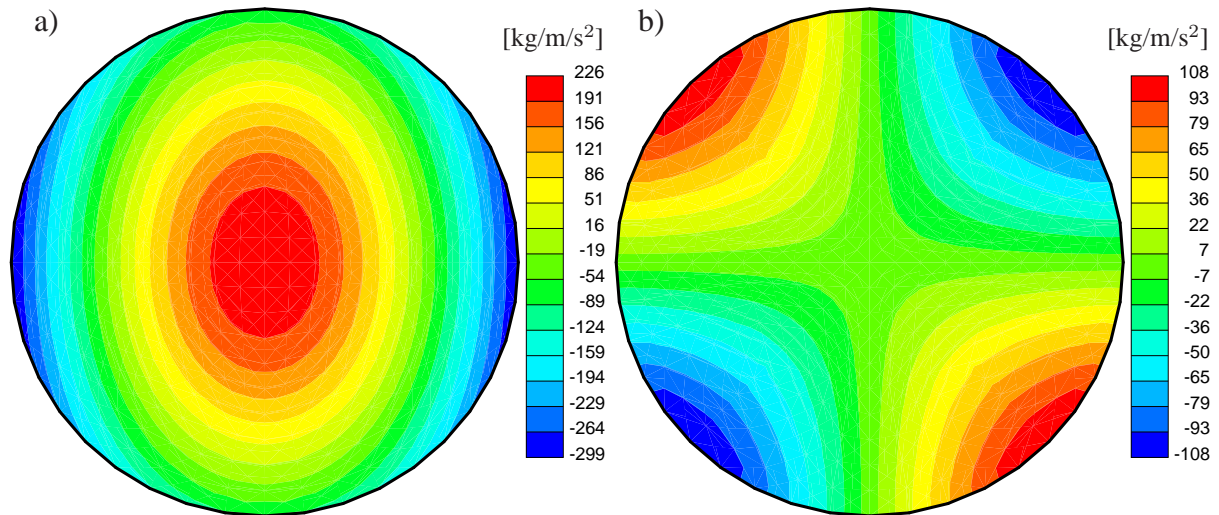


Bild 6.3: Numerische Spannungslösung der wiederhergestellten Spannungen: a) T^{xx} , b) T^{xy} .

Die Berechnung erfolgt auf verschieden fein diskretisierten Netzen mit in Richtung der kartesischen Koordinatenachsen gewählten Knotenabständen $d_n = 5,0$ m der gröbsten bis $d_n = 0,05$ m der feinsten Diskretisierung. Die Diskretisierung des Berechnungsgebietes mit $d_n = 1,0$ m ist in Bild 6.2 b) dargestellt. Die Zeitschrittweite aller Berechnungen ist zu $\Delta t = 0,01$ s gewählt. Am Rand des Berechnungsgebietes sind Geschwindigkeitsrandbedingungen $\mathbf{v}_R = \mathbf{v}(\mathbf{x}_R)$ entsprechend der gegebenen Winkelgeschwindigkeit gesetzt. Bei diesem Testfall ist zu beachten, dass

sich die Scheibe im eingefahrenen Zustand befindet und die an den Punkten des Berechnungsgebietes auftretenden Geschwindigkeiten $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ stationär sind. Damit entfallen, konform zur analytischen Lösung, die Zeitableitungsterme der schwachen Form der Impulsbilanz in (6.1). Bild 6.3 zeigt beispielhaft die aus ZZ-PR-Wiederherstellung ermittelten Spannungslösungen für T^{xx} und T^{xy} auf der in Bild 6.2 b) dargestellten Diskretisierung.

Die Approximationsgüte der numerisch ermittelten Gebietslösung der Spannungskomponenten T^{num} im Vergleich mit den jeweiligen analytischen berechneten Spannungskomponenten T^{ana} gibt der relative Spannungsfehler

$$E_{\text{Spann}} = \sqrt{\frac{\int_{\Omega} (T^{\text{num}} - T^{\text{ana}})^2 d\Omega}{\int_{\Omega} (T^{\text{ana}})^2 d\Omega}}, \quad (6.20)$$

der mit den Integralen über das räumliche Berechnungsgebiet Ω in der L_2 -Norm formuliert und ausgewertet ist. Das Konvergenzverhalten der Spannungen T^{xx} und T^{xy} ist für Berechnungen mit und ohne initial vorgegebene analytische Spannungslösung in Bild 6.4 dargestellt. Da die Konvergenzverläufe für T^{yy} sich nicht wesentlich von denen für T^{xx} unterscheiden, sind diese nicht gezeigt. Es sind sowohl die Konvergenzverläufe der elementweise konstanten Spannungen als auch die der räumlich linearen Spannungsverläufe aus ZZ-PR-Wiederherstellung untersucht. Der relative Spannungsfehler der elementweise konstant approximierten Spannungen konvergiert mit und ohne initial gegebener analytischer Spannungslösung bei feiner werdender Diskretisierung mit 1. Ordnung gegen Null. Bei den aus ZZ-PR-Wiederherstellung ermittelten Spannungen jedoch fällt die Konvergenzordnung des relativen Spannungsfehlers von 2 bei gegebener analytischer Ausgangslösung der Spannungen auf 1,86 für die Normalspannungen und 1,62 für die Schubspannung bei Berechnung ohne initial gegebene Spannungslösung ab.

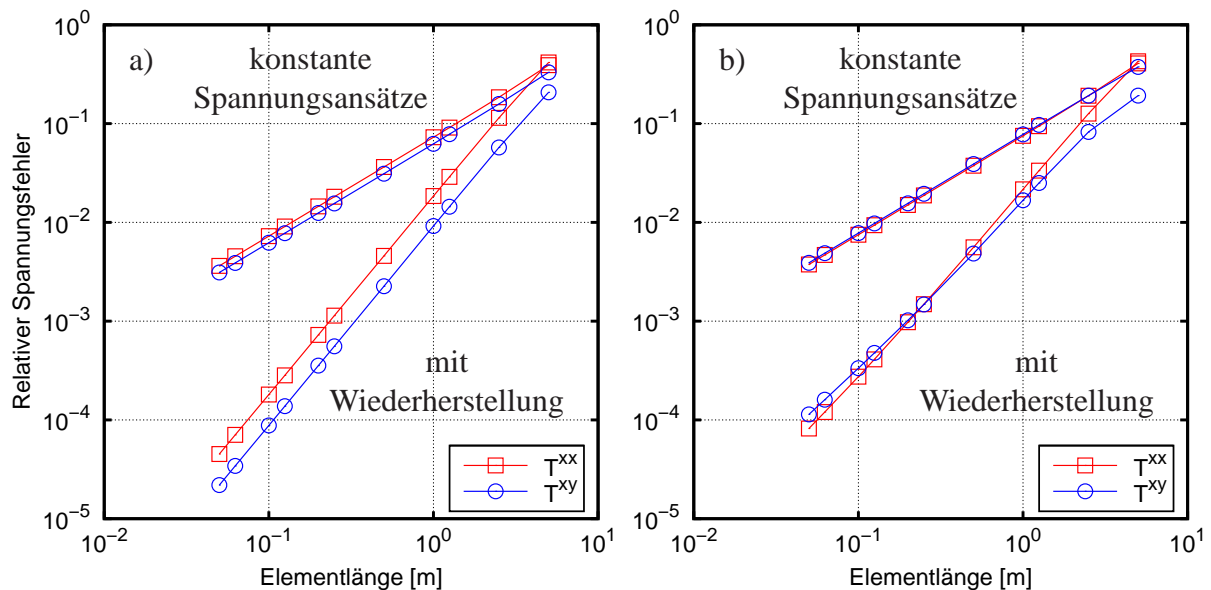


Bild 6.4: Konvergenz des relativen Spannungsfehlers: a) mit, b) ohne analytische Ausgangslösung.

6.3 Berücksichtigung plastischen Materialverhaltens

Die Elastizitätstheorie beschreibt lediglich reversible Verformungsprozesse. Bodenmaterialien weisen jedoch ausgeprägt nichtlineares Materialverhalten mit irreversiblen Verformungen auf. Deren Erfassung erfordert weiterführende Materialmodelle. Dafür eignet sich z. B. die Plastizitätstheorie, die das irreversible Fließen von Materialien bei Erreichen einer bestimmten Beanspruchungsgrenze erfasst. Diese Beanspruchungsgrenze ist als Fließbedingung

$$f(\tilde{\mathbf{T}}) = 0 \quad (6.21)$$

bezeichnet und mit den Spannungen als Maß der inneren Beanspruchung festgelegt [36]. Dafür werden hier die Spannungskomponenten des Kirchhoff'schen Spannungstensors $\tilde{\mathbf{T}}$ verwendet. Die Fließbedingung kann anschaulich als Fließfläche im Hauptspannungsraum gedeutet werden und bildet den Übergang von elastischem ($f < 0$) zu plastischem Materialverhalten. Nach dem Auftreten von plastischen Verzerrungen kann sich das plastische Materialverhalten realer Materialien jedoch ändern. Dieses Phänomen ist allgemein unter dem Begriff Verfestigung zusammengefasst und wird im Rahmen der Modellierung durch modifizierte Fließbedingungen berücksichtigt. Dabei ist zwischen isotroper (Aufweitung), kinematischer (Verschiebung) und formativer (Formänderung) Verfestigung der Fließfläche im Spannungsraum zu unterscheiden. Vereinfachend ist verfestigendes Materialverhalten im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht berücksichtigt. Das Werkstoffverhalten während Fließvorgängen ist mit der Fließregel festgelegt. Sie gibt den Zusammenhang zwischen Spannungen und plastischen Verzerrungen bzw. deren Raten an. Dabei ist zwischen assoziierten und nichtassoziierten Fließregeln zu unterscheiden. Ihr Unterschied liegt in der Beschränktheit der Richtung der plastischen Verzerrungen bzw. der Richtung der plastischen Verzerrungsraten bezüglich der Fließfläche.

Die bedeutendste Fließbedingung für reibungsbehaftete Bodenmaterialien ist die Mohr-Coulomb-Fließbedingung. Mit den Invarianten des Spannungstensors kann sie in der Form

$$f_{MC} = \sqrt{J_{2,\tilde{\mathbf{T}}}} \left(\cos(\theta) + \frac{\sin \phi'}{\sqrt{3}} \sin(\theta) \right) + I_{1,\tilde{\mathbf{T}}} \frac{\sin \phi'}{3} - c' \cos \phi' = 0 \quad (6.22)$$

angeben werden [86]. Darin ist der Lode-Winkel

$$\theta = \frac{1}{3} \arcsin \left(\frac{\sqrt{27} J_{2,\tilde{\mathbf{T}}}}{2 J_{3,\tilde{\mathbf{T}}}^{3/2}} \right) \quad (6.23)$$

ein Maß für die polare Position eines Spannungspunktes in der Deviatorebene und, wie in Bild 6.5 a) skizziert, auf den Bereich $-30^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$ beschränkt. Die Invarianten des Spannungstensors sind mit

$$I_{1,\tilde{\mathbf{T}}} = \text{tr} \tilde{\mathbf{T}} \quad , \quad I_{2,\tilde{\mathbf{T}}} = \frac{1}{2} \left(\text{tr}(\tilde{\mathbf{T}})^2 - (\text{tr} \tilde{\mathbf{T}})^2 \right) \quad \text{und} \quad I_{3,\tilde{\mathbf{T}}} = \det \tilde{\mathbf{T}} \quad (6.24)$$

gegeben, während die Invarianten des Deviators des Spannungstensors

$$\tilde{\mathbf{T}}_D = \text{dev} \tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}} - \frac{\text{tr} \tilde{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{1} \quad (6.25)$$

mit J anstelle von I bezeichnet sind. Der innere Reibungswinkel ϕ' und die Kohäsion c' sind für die entsprechenden Materialien aus Triaxial- oder Scherversuchen zu bestimmen. Im dreidimensionalen Hauptspannungsraum mit den Hauptspannungen \tilde{T}_1, \tilde{T}_2 und \tilde{T}_3 bildet die Fließfläche (6.22) der Mohr-Coulomb-Fließbedingung eine Pyramide mit sechseckigem Grundriss. Aufgrund unterschiedlichen Materialverhaltens bei Kompression und Extension ist diese jedoch nicht symmetrisch zur Raumdiagonalen, wie in Bild 6.5 gezeigt.

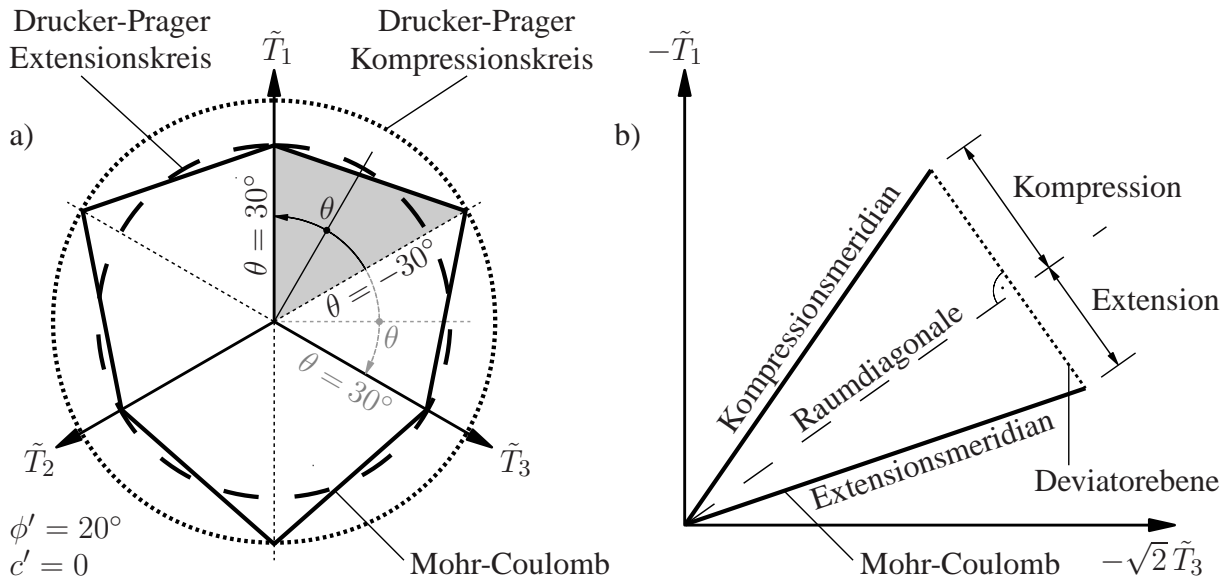


Bild 6.5: Fließbedingungen im Hauptspannungsraum: a) Deviatorebene, b) Triaxialebene ($\tilde{T}_2 = \tilde{T}_3$).

Die spezielle Form der Mohr-Coulomb-Fließbedingung führt zu einem erheblichen Mehraufwand bei der numerischen Implementation. Entsprechend existieren verschiedene weitere Flächen-Fließbedingungen, die (6.22) annähern, jedoch numerisch einfacher zu handhaben sind. Die einfachste und älteste dieser Näherungen ist die Drucker-Prager-Fließbedingung [40]

$$f_{DP} = \sqrt{J_{2,\tilde{T}}} + \alpha_f I_{1,\tilde{T}} - \kappa_f = 0 \quad , \quad (6.26)$$

die im Hauptspannungsraum einen Kreiskegel um die Raumdiagonale bildet. Der Parameter α_f gibt den Öffnungswinkel, der Parameter κ_f die Durchmesserergrößerung infolge Kohäsion an.

	θ	α_f	κ_f
Kompressionskegel	-30°	$\frac{2 \sin \phi'}{\sqrt{3}(3 - \sin \phi')}$	$\frac{6 c' \cos \phi'}{\sqrt{3}(3 - \sin \phi')}$
Schubkegel	0°	$\frac{\sin \phi'}{3}$	$c' \cos \phi'$
Extensionskegel	30°	$\frac{2 \sin \phi'}{\sqrt{3}(3 + \sin \phi')}$	$\frac{6 c' \cos \phi'}{\sqrt{3}(3 + \sin \phi')}$

Tabelle 6.1: Modellparameter der Drucker-Prager-Fließbedingung.

Die Größe beider Parameter kann dabei z. B. durch Vorgabe eines festen Winkels θ aus dem Mohr-Coulomb-Kriterium (6.22) ermittelt werden. Die Parameterwerte für den Kompressions-,

den Schub- sowie den Extensionskegel sind in Tabelle 6.1 angegeben, während verschiedene Werte des ebenen Verzerrungszustandes in Abschnitt 6.3.2 hergeleitet sind. Der Vergleich verschiedener Fließflächen in Bild 6.5 a) zeigt, dass das Drucker-Prager-Kriterium unterschiedliches Verhalten reibungsbehafteter Materialien unter Extension und Kompression nicht zufriedenstellend beschreibt. Der Kompressionskegel umfasst alle Spannungspunkte, überschätzt jedoch die Beanspruchbarkeit erheblich. Bei Bodenmaterialien ist daher von dieser Art der Anpassung abzuraten. Im Gegensatz dazu unterschätzen der Extensions- und der Schubkegel die Beanspruchbarkeit unter Kompression zwar, nähern die Beanspruchbarkeit unter Extension jedoch gut an. Sie sind zur Modellierung von Bodenmaterialien besser geeignet. Im Bereich kleiner Winkel liegen Extensions- und Schubkegel nah beieinander und stimmen für innere Reibungswinkel von $\phi' = 27,652^\circ$ sogar überein. Im Rahmen dieser Arbeit werden die Parameter des ebenen Verzerrungszustandes (siehe Abschnitt 6.3.2) zusammen mit einer modifizierten Drucker-Prager-Fließbedingung

$$f_{MDP} = \sqrt{J_{2,\tilde{\mathbf{T}}} + \frac{1}{2} \delta I_{1,\tilde{\mathbf{T}}}^2} + \alpha_f I_{1,\tilde{\mathbf{T}}} - \kappa_f = 0 \quad (6.27)$$

verwendet. Darin ist δ lediglich im Zugbereich ($I_{1,\tilde{\mathbf{T}}} > 0$) ungleich Null und steuert die Abrundung der Kegelspitze, siehe auch [42, 86]. Für $\alpha_f = \delta = 0$ in (6.27) folgt die von Mises-Fließbedingung, wenn $\sqrt{3} \kappa_f$ gleich der Fließspannung ist.

Unter der getroffenen Annahme kleiner elastischer Verzerrungen ist die Aufteilung des Almansi'schen Verzerrungstensors in einen elastischen und einen inelastischen Anteil zulässig [36],

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\text{el}} + \mathbf{A}^{\text{in}} \quad (6.28)$$

Darin ist \mathbf{A}^{el} der elastische (reversible) und \mathbf{A}^{in} der inelastische (irreversible) Anteil der Almansi-Verzerrungen. Mit der unteren Oldroyd-Ableitung (2.31) des Almansi'schen Verzerrungstensors folgen die reversiblen und irreversiblen Anteile des Verzerrungsgeschwindigkeitstensors,

$$\overset{\Delta}{\mathbf{A}} = \mathbf{D} = \mathbf{D}^{\text{el}} + \mathbf{D}^{\text{in}} \quad (6.29)$$

Da lediglich elastische Verzerrungsgeschwindigkeiten Spannungsraten hervorrufen, folgt mit $\mathbf{D}^{\text{el}} = \mathbf{D} - \mathbf{D}^{\text{in}}$ die umgeformte Materialgleichung (2.35) der räumlichen Ratenformulierung elastischer Materialien,

$$\underline{\mathbf{C}}^{-1} : \frac{\rho_0}{\rho} \overset{\square}{\mathbf{T}} - (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{\text{in}}) = \mathbf{0} \quad (6.30)$$

Die Modellierung inelastischer Verzerrungsgeschwindigkeiten \mathbf{D}^{in} erfolgt im Rahmen dieser Arbeit mit dem Ansatz

$$\mathbf{D}^{\text{in}} = \dot{p} \frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{T}}} \quad (6.31)$$

Darin ist g ein plastisches Potential, dessen Gradient bezüglich der Spannungen die Entwicklungsrichtung der inelastischen Verzerrungsgeschwindigkeiten bestimmt und \dot{p} bringt die viskoplastische Stoffgesetzformulierung ein. Hinsichtlich des plastischen Potentials werden assoziierte Fließregeln, bei denen das plastische Potential gleich der Fließfläche ist, und nichtassoziierte Fließregeln, bei denen das plastische Potential ungleich der Fließfläche ist, unterschieden.

Assoziierte Fließregeln folgen aus dem Drucker'schen Stabilitätspostulat für konvexe Fließflächen und eignen sich zur Beschreibung metallischen Werkstoffverhaltens. Zur Modellierung reibungsbehafteter Materialien eignen sie sich jedoch nicht, denn die Abhängigkeit der Fließfläche von der ersten Invarianten des Spannungstensors führt auf eine experimentell nicht bestätigte Volumenzunahme des Materials [41, 86]. Entsprechend wird ein plastisches Potential verwendet, das der Fließregel zwar ähnlich ist, jedoch anstelle des Winkels der inneren Reibung ϕ' den Dilatanzwinkel ψ im Parameter α_g verwendet,

$$g = \sqrt{J_{2,\tilde{\mathbf{T}}} + \frac{1}{2} \delta I_{1,\tilde{\mathbf{T}}}^2} + \alpha_g I_{1,\tilde{\mathbf{T}}} \quad . \quad (6.32)$$

Die Bestimmung von α_g kann mit Tabelle 6.1 erfolgen, wenn in den entsprechenden Beziehungen der Winkel der inneren Reibung durch den Dilatanzwinkel ersetzt wird. Da der Winkel der inneren Reibung und der Dilatanzwinkel unabhängig voneinander sind, erlaubt die Modellierung mit (6.32) eine bessere Anpassung an experimentelle Ergebnisse.

Anders als bei ideal-plastischen Werkstoffen, mit möglichen Spannungspunkten lediglich auf oder innerhalb der Fließfläche, ist die Ausbildung inelastischer Verzerrungen bei viskoplastischem Materialverhalten mit der Überschreitung der Fließfläche (Überspannung) verbunden. Entsprechend erfordert die Modellierung viskoplastischen Werkstoffverhaltens neben der Geschwindigkeitsrichtung $\frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}}$ einen Ansatz \dot{p} zur Entwicklung inelastischer Verzerrungsgeschwindigkeiten in Überspannungsbereichen. Dafür ist im Rahmen dieser Arbeit eine Evolutionsgleichung vom Perzyna-Typ [121] gewählt,

$$\dot{p} = \gamma \left\langle \frac{f}{\sigma_0} \right\rangle^n, \quad \langle (*) \rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } (*) \leq 0 \\ (*) & \text{für } (*) > 0 \end{cases}, \quad (6.33)$$

die mit den Macauley-Klammern $\langle (*) \rangle$ lediglich in Überspannungsbereichen $f > 0$ definiert ist. Die Fluidität γ legt die maximale Größe von Überspannungszuständen fest, sowie, mit welcher Geschwindigkeit diese abgebaut werden. Der Exponent n bestimmt die Ratenempfindlichkeit und ist zur Gewährleistung der Konvexität des Klammerausdruckes im Allgemeinen $n \geq 1$ zu wählen. Die Spannung σ_0 normiert den Ausdruck unter der Klammer.

6.3.1 Iteration der viskoplastischen Anteile

Der inelastische Anteil der Verzerrungsgeschwindigkeiten (6.31) ist mit dem Gradienten des plastischen Potentials und der Evolutionsgleichung (6.33) aus den aktuellen Spannungen zu ermitteln, die mit der Ratenformulierung (6.30) wiederum von den inelastischen Verzerrungsgeschwindigkeiten abhängen. Entsprechend ist die Berechnung der aktuellen Spannungen bei Spannungspunkten außerhalb der Fließfläche nur noch iterativ möglich. Die Berechnung des aktuellen Spannungszustandes erfolgt im Rahmen dieser Arbeit nach jeder globalen Geschwindigkeitsiteration elementweise. Dafür ist ein Picard-Iterationsschema gewählt, für das die inela-

stischen Verzerrungsgeschwindigkeiten

$$\mathbf{D}^{\text{in}} = \underbrace{\gamma \left\langle \frac{f}{\sigma_0} \right\rangle^n \frac{1}{2 \sqrt{J_{2,\tilde{\mathbf{T}}} + \frac{1}{2} \delta \langle I_{1,\tilde{\mathbf{T}}} \rangle^2}}}_{\text{nichtlinear}} \underbrace{\left(\tilde{\mathbf{T}}_D + \delta \langle I_{1,\tilde{\mathbf{T}}} \rangle \mathbf{1} \right)}_{\text{linear}} + \underbrace{\gamma \left\langle \frac{f}{\sigma_0} \right\rangle^n \alpha_g \mathbf{1}}_{\text{nichtlinear}} \quad (6.34)$$

in lineare und nichtlineare Anteile aufgeteilt werden. Die im Vergleich mit der Drucker-Prager-Fließfläche modifizierten Terme in (6.27) sind nur im Zugbereich gültig und stehen entsprechend unter Macauley-Klammern. Während die nichtlinearen Anteile mit den Spannungswerten der letzten Picard-Iteration bestimmt werden, erfolgt die Ermittlung der linearen Anteile im aktuellen Iterationsschritt. Die Iteration der Spannungen im Rahmen der Nachlaufrechnung erfolgt so lange, bis die Veränderung der Spannungswerte aufeinanderfolgender Iterationsschritte die Fehlerschranke eines geeigneten Fehlermaßes unterschreitet. Aufgrund des fixpunktartigen Iterationsschemas hat es sich als günstig erwiesen, eine Unterrelaxation der Spannungsvariablen mit adaptivem Relaxationsfaktor des auf Vektoren erweiterten Aitken'schen Δ^2 -Schemas [78] vorzunehmen. Die iterative Lösung der Materialgleichung (6.30) in den Elementen der Raum-Zeit-Scheibe Q_n erfolgt so lange abwechselnd mit der Ermittlung globaler Spannungswerte \mathbf{T}_{glob} mit ZZ-PR-Wiederherstellung, bis beide Lösungen ausiteriert sind.

6.3.2 Ebener Verzerrungszustand

Während die Modellparameter der Drucker-Prager-Fließbedingung in Tabelle 6.1 sehr einfach mit Wahl des entsprechenden Lode-Winkels θ zu ermitteln sind, ist die Berechnung im ebenen Verzerrungszustand an verschwindende Verzerrungen und Verzerrungsgeschwindigkeiten in Dickenrichtung geknüpft. Dafür sind sowohl die elastischen, als auch die inelastischen Verzerrungsgeschwindigkeitsanteile zu berücksichtigen. Mit Vernachlässigung des δ -Terms in (6.32) (zur Vermeidung nichtlinearer Terme) führt das Verschwinden der entsprechenden Verzerrungsgeschwindigkeitsanteile in (6.31) auf Invariantenausdrücke für $I_{1,\tilde{\mathbf{T}}}$ und $J_{2,\tilde{\mathbf{T}}}$ im Zustand der Traglast, siehe z. B. [143]. Diese liefern nach Einsetzen in die Drucker-Prager-Fließbedingung und Koeffizientenvergleich mit dem Mohr-Coulomb-Kriterium die Ausdrücke

$$3 \alpha_f \frac{\sqrt{1 - 3 \alpha_g^2}}{1 - 3 \alpha_g \alpha_f} = \sin \phi' \quad , \quad \kappa_f \frac{\sqrt{1 - 3 \alpha_g^2}}{1 - 3 \alpha_g \alpha_f} = c' \cos \phi' \quad . \quad (6.35)$$

Für assoziierte Fließregeln ist der Winkel der inneren Reibung ϕ' gleich dem Dilatanzwinkel ψ und damit $\alpha_g = \alpha_f$. Entsprechend führt die Auswertung von (6.35) auf

$$\alpha_f(\phi') = \frac{\sin \phi'}{\sqrt{9 + 3 \sin^2 \phi'}} \quad , \quad \kappa_f(\phi') = \frac{3 c' \cos \phi'}{\sqrt{9 + 3 \sin^2 \phi'}} \quad , \quad (6.36)$$

bzw. entsprechende Ausdrücke für den Dilatanzwinkel, wenn dieser anstelle des Winkels der inneren Reibung in (6.36) eingesetzt wird. Der mit (6.36) ermittelte Drucker-Prager-Fließzylinder entspricht dem berührenden Innenkegel an die sechseckige Mohr-Coulomb-Pyramide und

stellt damit eine untere Grenze der Festigkeit reibungsbehafteter Materialien dar. Die jeweiligen Modellparameter bei nichtassoziertem Fließen folgen ebenfalls mit (6.35),

$$\alpha_f = \frac{\sin \phi'}{3 \left(\alpha_g \sin \phi' + \sqrt{1 - 3 \alpha_g^2} \right)} \quad , \quad \kappa_f = \frac{c' \cos \phi'}{\left(\alpha_g \sin \phi' + \sqrt{1 - 3 \alpha_g^2} \right)} \quad , \quad (6.37)$$

wobei der Vektor der plastischen Verzerrungsgeschwindigkeiten normal auf der Potentialfläche des plastischen Potentials (6.32) steht. Somit ist $\alpha_g(\psi)$ mit dem Ausdruck für assoziiertes Fließen in (6.36) zu ermitteln. Der Spezialfall $\psi = 0$ des volumenkonstanten Fließens führt auf die Parameterwerte

$$\alpha_f = \frac{\sin \phi'}{3} \quad , \quad \kappa_f = c' \cos \phi' \quad , \quad (6.38)$$

die den Werten des Schubkegels in Tabelle 6.1 entsprechen.

6.3.3 Viskoplastisches Materialverhalten

Die vorgestellte Formulierung zur Berücksichtigung viskoplastischen Materialverhaltens wird an einem einfachen Testfall untersucht. Dafür ist die in Bild 6.6 dargestellte quadratische Scheibe mit der Länge $L = 100$ cm gegeben, die für die Dauer von $t = 0,015$ s in x-Richtung gezogen wird. Am rechten Scheibenrand wirkt eine Geschwindigkeit von $v_x = 100$ cm/s, während der linke Rand mit $v_x = 0$ cm/s unbeweglich ist. Geschwindigkeiten in y-Richtung treten im gesamten Gebiet nicht auf und sind am oberen und unteren Rand zu $v_y = 0$ cm/s gesetzt. Aufgrund des in der gesamten Scheibe identischen Spannungs-Verformungsverhaltens, sind zur Diskretisierung des Berechnungsgebietes lediglich zwei Elemente notwendig, siehe Bild 6.6.

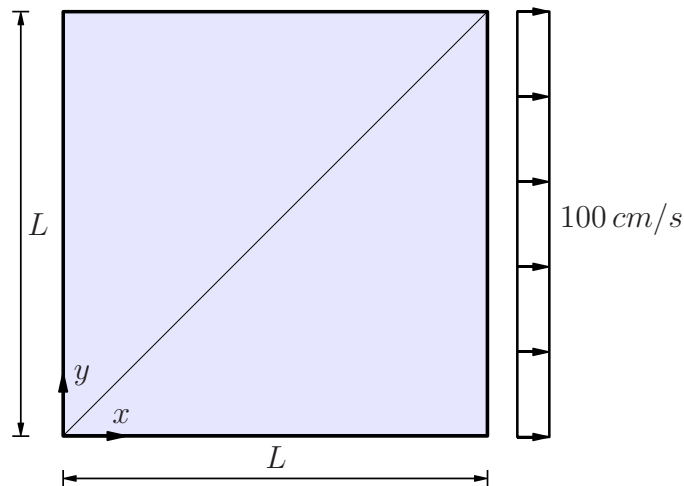


Bild 6.6: Beispiel und Diskretisierung.

Vereinfachend ist angenommen, dass die Dichte mit $\rho(t) = \rho_0 = 1,0$ g/cm³ zeitlich konstant ist. Damit sind die Kirchhoff-Spannungen $\tilde{\mathbf{T}}$ gleich den Cauchy-Spannungen \mathbf{T} . Der Elastizitätsmodul ist zu $E = 1,0 \cdot 10^8$ kg/cm/s² und die Querdehnzahl zu $\nu = 0,0$ gewählt. Die Berechnungen erfolgen mit der Fließbedingung $f = \sqrt{J_{2,\mathbf{T}}} - T_f/\sqrt{3}$ nach von Mises und assoziierter

Fließregel. Die Fließspannung ist im Rahmen dieses Beispiels zu $T_f = 10^4 \text{ kg/cm/s}^2$ gesetzt. Mit $\sigma_0 = T_f/\sqrt{3}$ in (6.33) folgt die Evolutionsgleichung nach Perzyna

$$\dot{p} = \gamma \left\langle \frac{\sqrt{3} J_{2,T}}{T_f} - 1 \right\rangle^n . \quad (6.39)$$

Im elastischen Bereich treten entsprechend der Belastung und aufgrund der nicht vorhandenen Querdehnung lediglich Normalspannungen T^{xx} auf. Nach Überschreiten der Fließspannung sind aufgrund der assoziierten Fließregel und der vorgegebenen Randbedingungen der Geschwindigkeiten plastische und elastische Verzerrungsraten in y-Richtung vorhanden, wodurch auch Normalspannungen T^{yy} auftreten. Mit der gegebenen viskoplastischen Formulierung streben die Spannungen einem Gleichgewichtszustand entgegen, bei dem die elastischen Spannungsrate verschwinden. Werden dabei die Zeitableitungen der Spannungen berücksichtigt und die weiteren Anteile der Spannungsrate vernachlässigt, dann sind die aufgebrachten Verzerrungsraten \mathbf{D} gleich den inelastischen Verzerrungsraten \mathbf{D}^{in} . Damit folgen unter Berücksichtigung der gegebenen Verzerrungsrate $v_{x,x} = 1/s$ die analytisch ermittelten Spannungswerte

$$\frac{1}{2} T^{xx} = T^{yy} = \left(\left(\frac{2}{\gamma} \right)^{\frac{1}{n}} + 1 \right) \frac{T_f}{\sqrt{3}} . \quad (6.40)$$

Werden auch die weiteren Anteile der Spannungsrate berücksichtigt, existieren im Allgemeinen keine analytischen Lösungen für die Spannungen im Gleichgewichtszustand. Die Ergebnisse der Berechnungen mit $\gamma = \{1, 2, 10\}$ und $n = \{1, 2, 5\}$ sind in Bild 6.7 dargestellt.

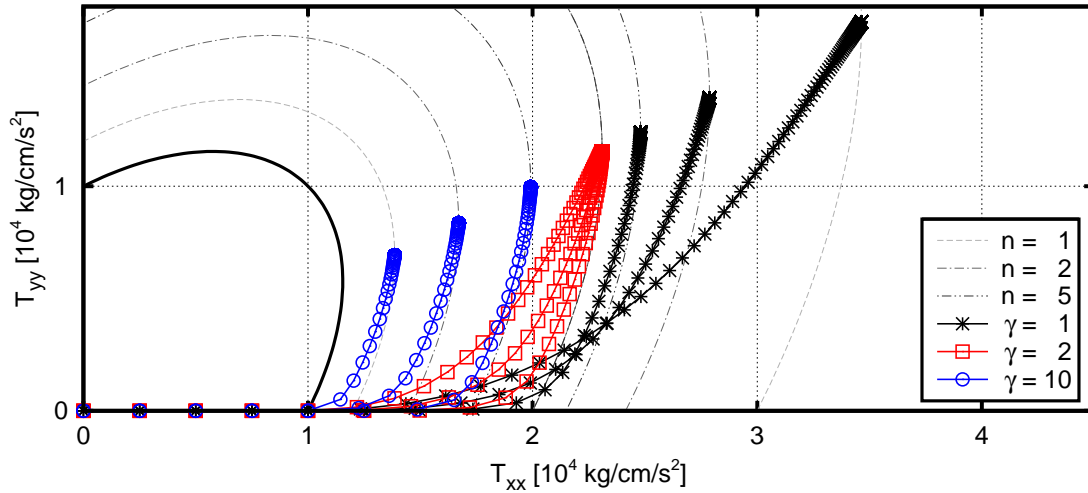


Bild 6.7: Spannungsevolution in der T^{xx} - T^{yy} -Ebene bei verschiedenen Evolutionsparametern.

Bei allen untersuchten Modellparametern streben die berechneten Spannungen dem Gleichgewicht nach Gleichung (6.40) entgegen und erreichen dies mit Rechnergenauigkeit. Für den Spezialfall $\gamma = 2$ streben die Spannungen unabhängig vom gewählten n dem gleichen Endwert entgegen, jedoch auf einem jeweils anderen Pfad durch den Spannungsraum. Dabei sinkt die Ratenempfindlichkeit mit steigendem n , wenn der Ausdruck unter der Macauley-Klammer in (6.39) den Wert Eins nicht übersteigt. Bei Klammerausdrücken größer als Eins nimmt die Ratenempfindlichkeit mit steigendem n zu. Werte von $\gamma > 2$ führen zu größeren Überspannungen bei wachsendem n , während die Größe der Überspannungen bei Werten von $\gamma < 2$ und wachsendem n abnimmt.

6.4 Einbringen von Übergangsbedingungen

Im Rahmen dieser Arbeit ist der in Euler'scher Betrachtung formulierte Feststoff mit einem umgebenden inkompressiblen Fluid oberflächengekoppelt. Ausgangspunkt der Kopplung bei der Kontinua ist die in Abschnitt 5.2.2 vorgestellte örtlich gemischt-hybride Kopplungsmethodik nach Zilian & Fries [167]. Dabei wird ausgenutzt, dass der Feststoff bereits mit gemischt-hybriden Elementen formuliert ist. Ein Mehraufwand durch Invertierung von Elementuntermatrizen entsteht also nicht. Die Dynamik der Grenzfläche ist mit der Level-Set-Methodik erfasst. Mit den jeweiligen Indizes S und F für Struktur und Fluid folgen die Grenzflächenterme „G.T.“ der über die Raum-Zeit-Scheibe Q_n partiell integrierten Impulsbilanzen in (5.5) und (6.1),

$$\text{G.T.} = - \int_{R_n^F} \delta \mathbf{v}_F \mathbf{T}_F \cdot \mathbf{n}_F \, dR - \int_{R_n^S} \delta \mathbf{v}_S \mathbf{T}_S \cdot \mathbf{n}_S \, dR = \int_{R_n} [\![\delta \mathbf{v} \mathbf{T}]\!] \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR \quad . \quad (6.41)$$

Darin ist die Grenzfläche mit R_n bezeichnet, während die Grenzflächenseiten, die Spannungstensoren und die äußeren Gebietsnormalenvektoren mit den jeweiligen Indizes gekennzeichnet sind. Der Sprungterm einer physikalischen Größe x ist mit $[x] = x_S - x_F$ definiert und der Grenzflächennormalenvektor $\bar{\mathbf{n}}$ entspricht dem äußeren Gebietsnormalenvektor \mathbf{n}_F . Bei unberücksichtigten Oberflächenspannungen führt das Einsetzen der Übergangsbedingungen (2.42) in die rechte Seite von (6.41) auf die schwache Form der Grenzflächenimpulsbilanz

$$\int_{R_n} [\![\delta \mathbf{v} \mathbf{T}]\!] \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR = \int_{R_n} [\![\delta \mathbf{v}]\!] \mathbf{T}_S \cdot \bar{\mathbf{n}} \, dR \quad . \quad (6.42)$$

Die Stetigkeit der Grenzflächengeschwindigkeiten (2.41) wird mit den zusätzlichen Termen

$$- \int_{R_n} \bar{\mathbf{n}} \cdot \delta \mathbf{T}_S [\![\mathbf{v}]\!] \, dR + \int_{R_n} [\![\delta \mathbf{v}]\!] \theta_{SF} [\![\mathbf{v}]\!] \, dR \quad (6.43)$$

in der schwachen Form der Kopplungsbedingungen berücksichtigt. Der zweite Term in (6.43) ist ein Nitsche-Term, der den Sprung $[v] \neq 0$ der Näherungslösung auf der Grenzfläche bestraft. Nach [167] sind zusätzliche Penalty-Terme nicht notwendig, der Nitsche-Term trägt jedoch zur Erhaltung der Masse über bewegte Grenzflächen bei, wie Abschnitt 5.5 zeigt. Die in [101] für lineare Elastizität verwendete Abhängigkeit des Penalty-Faktors θ_{SF} von der Elementgröße und den Materialparametern wird im Rahmen dieser Arbeit auf Raum-Zeit-Elemente übertragen und

$$\theta_{SF} = \vartheta_{SF} \cdot (\lambda + \mu) \cdot \frac{\Delta t}{h_e} \quad (6.44)$$

gewählt. Darin ist ϑ_{SF} eine material- und elementunabhängige skalarwertige Konstante, λ und μ sind die elastischen Materialparameter der Struktur, h_e ist ein lokales räumliches Längenmaß des grenzflächengeschnittenen Elementes und Δt ist die Zeitschrittweite. Der Faktor ϑ_{SF} ist in den hier gewählten Beispielen a priori gewählt.

Die Interaktion von Fluid und Struktur führt mit den schwachen Formulierungen (5.5) und (6.1) auf grenzflächengeschnittene Elemente mit Struktur- und Fluidanteilen. Darin sind die erweiterten Geschwindigkeitsansätze mit (4.16) angereichert und deren Stetigkeit mit den Kopplungstermen (6.43) in schwacher Form erzwungen. Strukturspannungen und Fluiddrücke sind lediglich auf einer der beiden Grenzflächenseiten zu approximieren und entsprechend mit ersetzenden Ansätzen unter Verwendung der Anreicherung (4.17) angenähert. Mit Anordnung

der Geschwindigkeitsfreiwerte im Vektor $\hat{\mathbf{v}}$, der Druckfreiwerte des Fluids im Vektor $\hat{\mathbf{p}}$ und der Spannungsfreiwerte der Struktur im Vektor $\hat{\mathbf{T}}$ folgt die Matrix-Vektor-Schreibweise der Bestimmungsgleichungen auf Elementebene,

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{M}} + \hat{\mathbf{N}} & -\hat{\mathbf{D}} & \hat{\mathbf{H}} + \hat{\mathbf{k}} \\ \hat{\mathbf{D}}^T & \hat{\mathbf{0}} & \hat{\mathbf{0}} \\ -\hat{\mathbf{H}}^T - \hat{\mathbf{k}}^T & \hat{\mathbf{0}} & \hat{\mathbf{F}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_n \\ \hat{\mathbf{p}}_n \\ \hat{\mathbf{T}}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{f}} + \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{v}}_{n-1} \\ \hat{\mathbf{0}} \\ \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{T}}_{n-1} \end{bmatrix} . \quad (6.45)$$

Die erste Zeile von (6.45) beinhaltet die schwache Form der Impulsbilanz beider Medien, die in die Impulsbilanz eingesetzte Materialgleichung des Fluids sowie die Kopplungsterme $\hat{\mathbf{k}}$ und $\hat{\mathbf{N}}$, die mit (6.42) gegeben sind. In der zweiten Zeile ist die schwache Form der Massenerhaltung des inkompressiblen Fluids berücksichtigt. Die dritte Zeile beinhaltet die schwache Form der Ratenformulierung der Werkstoffgleichung der Struktur sowie den Kopplungsterm $-\hat{\mathbf{k}}^T$, der mit (6.43) gegeben ist. Stabilisierungsterme sind in (6.45) aus Gründen der Übersichtlichkeit vernachlässigt. Die nach den Spannungsfreiwerten aufgelöste dritte Zeile,

$$\hat{\mathbf{T}}_n = \hat{\mathbf{F}}^{-1}(\hat{\mathbf{H}} + \hat{\mathbf{k}})^T \hat{\mathbf{v}}_n + \hat{\mathbf{F}}^{-1} \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{T}}_{n-1} , \quad (6.46)$$

führt nach Einsetzen in die erste Zeile von (6.45) auf lediglich in Geschwindigkeits- und Druckfreiwerten formulierte Elementmatrizen und -vektoren,

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{K}} & -\hat{\mathbf{D}} \\ \hat{\mathbf{D}}^T & \hat{\mathbf{0}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_n \\ \hat{\mathbf{p}}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{b}} \\ \hat{\mathbf{0}} \end{bmatrix} . \quad (6.47)$$

Darin ist die Elementuntermatrix $\hat{\mathbf{K}}$ der linken Seite mit

$$\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{M}} + \hat{\mathbf{N}} + (\hat{\mathbf{H}} + \hat{\mathbf{k}}) \hat{\mathbf{F}}^{-1} (\hat{\mathbf{H}} + \hat{\mathbf{k}})^T \quad (6.48)$$

und der Elementvektor $\hat{\mathbf{b}}$ der rechten Seite mit

$$\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{f}} + \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{v}}_{n-1} - (\hat{\mathbf{H}} + \hat{\mathbf{k}}) \hat{\mathbf{F}}^{-1} \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{T}}_{n-1} \quad (6.49)$$

gegeben. Die Bestimmung der Spannungsfreiwerte auf Elementebene erfolgt mit Auswertung von (6.46) im Rahmen einer Nachlaufrechnung.

Eine weitere Möglichkeit der Kopplung folgt mit Umstellen von (6.42) nach den Fluidspannungen \mathbf{T}_F anstelle der Strukturspannungen \mathbf{T}_S . Das Ersetzen der Fluidspannungen sowie der Fluidspannungsvariationen mit der Materialgleichung des Fluids führt dann auf Nitsche's Methode. Daraus entstehen jedoch keine weiteren Vorteile, da die Strukturspannungen im Rahmen der gemischt-hybriden Strukturformulierung weiterhin abgelöst werden müssen und die vorgestellte gemischt-hybride Kopplungsmethodik ebenso wie Nitsche's Methode ohne zusätzliche Freiwerte auskommt.

6.5 Fluid-Struktur-Kopplung

Bei diesem Testfall wird die Kopplung des in Euler'scher Betrachtung modellierten Festkörpers mit einem umgebenden Fluid untersucht. Dafür ist die mit fortschreitender Zeit abklingende freie Schwingung einer Platte unter Eigengewicht betrachtet. Aufgrund fehlender Strukturdämpfung ist die Schwingung lediglich durch die Viskosität des umgebenden Fluids gedämpft. Die Ausgangskonfiguration des Testfalles ist in Bild 6.8 dargestellt.

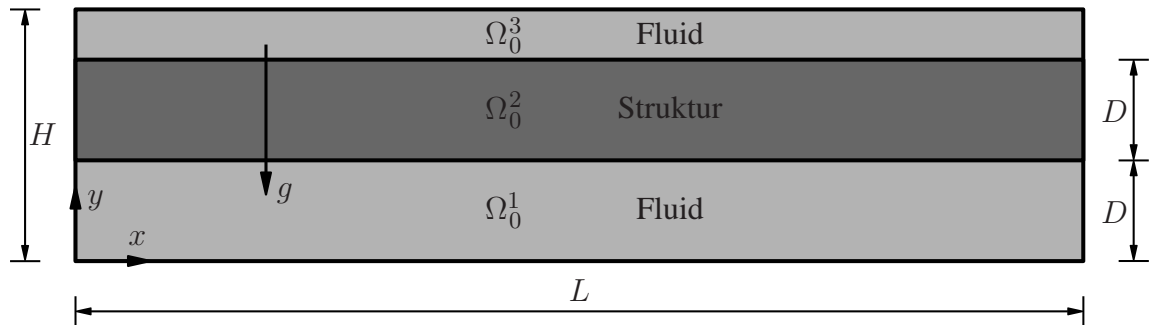


Bild 6.8: System mit anfänglicher Gebietsverteilung.

Das rechteckförmige Berechnungsgebiet besitzt die Abmessungen $L = 10,0$ m und $H = 2,5$ m und ist in die Teilgebiete Ω_t^1 , Ω_t^2 und Ω_t^3 aufgeteilt. Am linken und rechten Rand des an Ober- und Unterseite offenen Gebietes sind Hafttrandbedingungen gesetzt. In der Ausgangskonfiguration ist das Teilgebiet Ω_0^2 mit der Dicke $D = 1,0$ m im Abstand D zur Unterseite angeordnet. Unter- und oberseitig davon befinden sich die Teilgebiete Ω_0^1 und Ω_0^3 . Die Abgrenzung der Teilgebiete erfolgt mit der Level-Set-Methodik. Um eine links- und rechtsseitige Einspannung zu modellieren, ist der Gradient der Level-Set-Funktion so eingestellt, dass der Tangentialvektor der Level-Set-Funktion senkrecht auf den jeweiligen Gebietsrändern steht. Die Berechnungen sind auf der in Bild 6.9 dargestellten Diskretisierung mit 4096 finiten Raum-Zeit-Elementen für das Zeitintervall $I_t = (0; 2,5)$ s durchgeführt. Die Zeitschrittweite ist zu $\Delta t = 0,0025$ s gewählt.

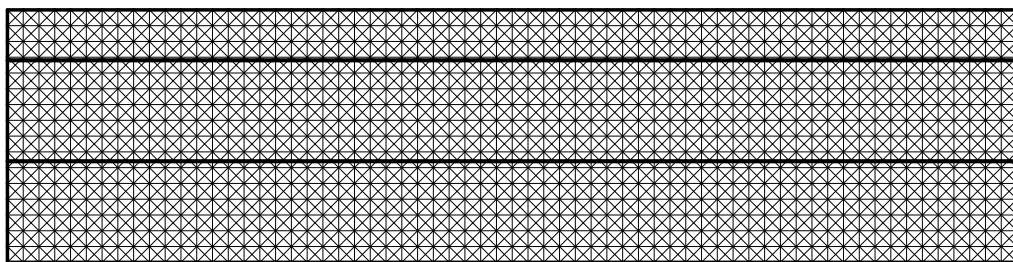


Bild 6.9: Diskretisierung.

Das Material im initialen Gebiet Ω_0^2 ist als linear-elastischer Feststoff mit den Materialparametern $E = 5,0 \cdot 10^5$ kg/m/s² und der Querdehnzahl $\nu = 0,2$ modelliert. Die Ausgangsdichte ist zu $\rho_0 = 1,0$ kg/m³ und die massenbezogene Beschleunigung zu $g = 100,0$ m/s² gewählt. Damit kann die Struktur in Ω_t^2 als einachsige gespannte Platte interpretiert werden. Die Materialien in den initialen Gebieten Ω_0^1 und Ω_0^3 sind als inkompressible linear-viskose Fluide mit gleichen

Materialeigenschaften modelliert. Sie besitzen die Dichten $\rho_1 = \rho_3 = 1,0 \text{ kg/m}^3$, während für die dynamische Viskosität Werte von $\mu_1 = \mu_3 = \{1, 10, 100\} \text{ kg/s/m}$ zur Untersuchung der Fluid-Struktur-Interaktion gewählt sind. Massenbezogene Beschleunigungen sind in den Fluidteilgebieten vernachlässigt.

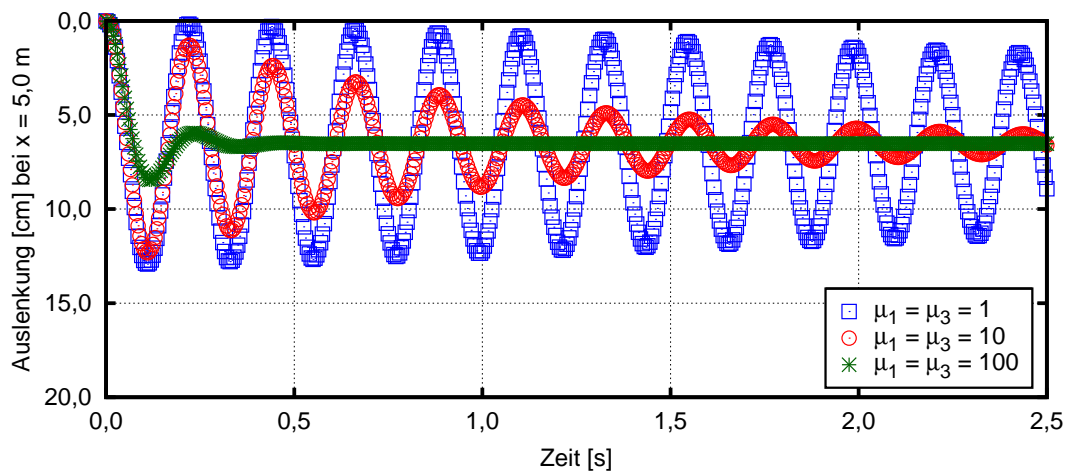


Bild 6.10: Auslenkung der Plattenunterseite bei $x = 5,0 \text{ m}$ für verschiedene Viskositäten.

Zu Beginn der Berechnung bewegt sich die Platte in Richtung der massenbezogenen Beschleunigung und fängt aufgrund der elastischen Materialeigenschaften und der eingespannten Lagerung an, um die endgültige Ruhelage zu schwingen. Bild 6.10 zeigt die zeitliche Entwicklung der Auslenkung der Plattenunterseite bei $x = 5,0 \text{ m}$ für die untersuchten Viskositätswerte. Die Frequenz der Schwingung ist von den Feststoffeigenschaften der Platte bestimmt, die Dämpfung jedoch von der Viskosität des umgebenden Fluids. Bei größeren Viskositäten ist die Dämpfung größer und damit die Auslenkung über die statische Ruhelage hinaus kleiner. Entsprechend sind auch die Beanspruchungen der Struktur infolge dynamischen Materialverhaltens geringer.

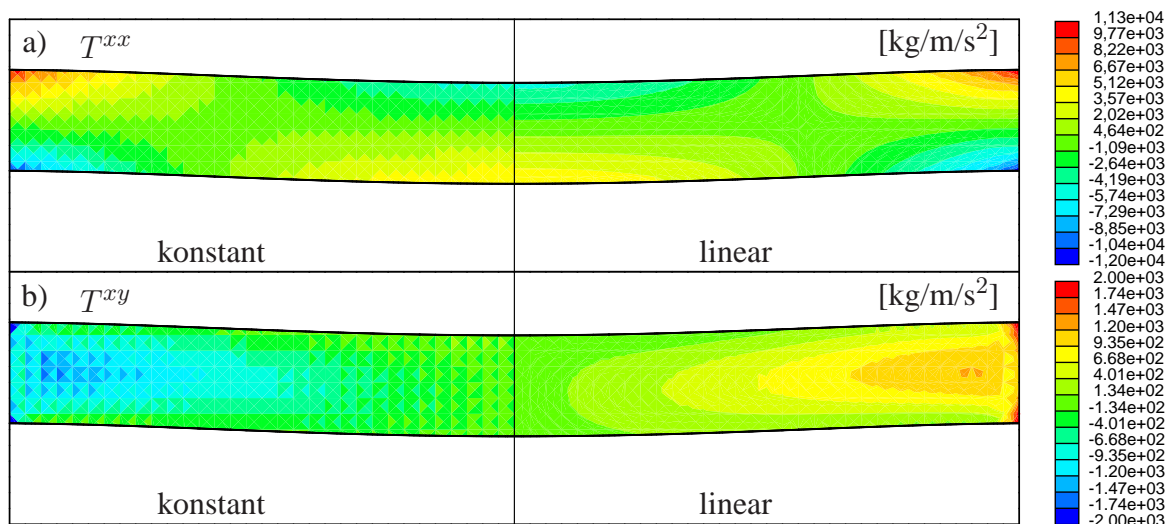


Bild 6.11: Spannungsverläufe der T^{xx} - und T^{xy} -Spannungen für $\mu_1 = \mu_3 = 1 \text{ kg/s/m}$ bei $t = 0,11 \text{ s}$.

Für die Viskositäten $\mu_1 = \mu_3 = 1 \text{ kg/s/m}$ sind die Spannungsverläufe der T^{xx} - und T^{xy} -Spannungen bei maximaler Auslenkung zum Zeitpunkt $t = 0,11 \text{ s}$ in Bild 6.11 gezeigt. Auf der

linken Seite sind die Spannungswerte der elementweise räumlich konstanten Spannungsansätze dargestellt und auf der rechten Seite die daraus ermittelten linearen Spannungsverläufe zur Ermittlung konvektiver Zeitableitungen. Während der Spannungsverlauf der Normalspannungen in Bild 6.11 a) oszillationsfrei ist, weisen die Schubspannungen in Bild 6.11 b) im Randbereich unphysikalische Lösungsverläufe auf. Diese sind nicht auf die Methodik, sondern auf die verwendeten räumlichen Dreieckselemente und die am Rand gesetzten Hafttrandbedingungen zurückzuführen. Dadurch verschwinden die Geschwindigkeitsableitungen nach y in Elementen mit vertikal übereinander gelagerten Randknoten und damit auch die jeweiligen Verzerrungsraten zur Ermittlung der Spannungsrate. Der Dichteverlauf des elastischen Materials ist in Bild 6.12 dargestellt. Auf der linken Seite sind die Werte der elementweise räumlich konstanten Ansätze dargestellt und auf der rechten Seite die daraus ermittelten linearen Dichteverläufe.

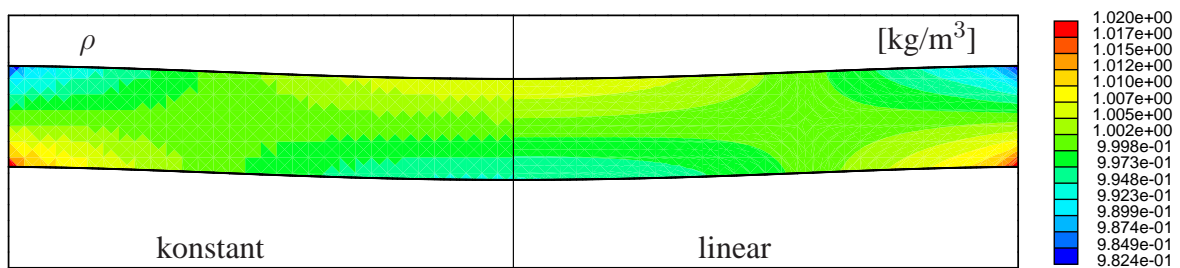


Bild 6.12: Verlauf der Dichte ρ für $\mu_1 = \mu_3 = 1 \text{ kg/s/m}$ bei $t = 0,11 \text{ s}$.

Zum Vergleich von elastischem und elastisch-plastischem Materialverhalten ist der betrachtete Testfall mit elastisch-plastischem Werkstoffgesetz berechnet. Dafür ist die Fließbedingung $f = \sqrt{J_{2,\tilde{\mathbf{T}}} - \tilde{T}_f/\sqrt{3}}$ nach von Mises mit assoziierter Fließregel gewählt. Die Fließspannung ist zu $\tilde{T}_f = 5 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^2 \text{ s}^2$ gesetzt und die Perzyna-Evolutionsgleichung folgt entsprechend (6.39) mit $\sigma_0 = \tilde{T}_f/\sqrt{3}$. Die Fluidität ist zu $\gamma = 20 \text{ m} \cdot \text{s/kg}$ und der Exponent zu $n = 1$ gesetzt. Die Zeitschrittweite ist aufgrund der Plastizität mit $\Delta t = 0,001 \text{ s}$ jetzt etwas kleiner gewählt.

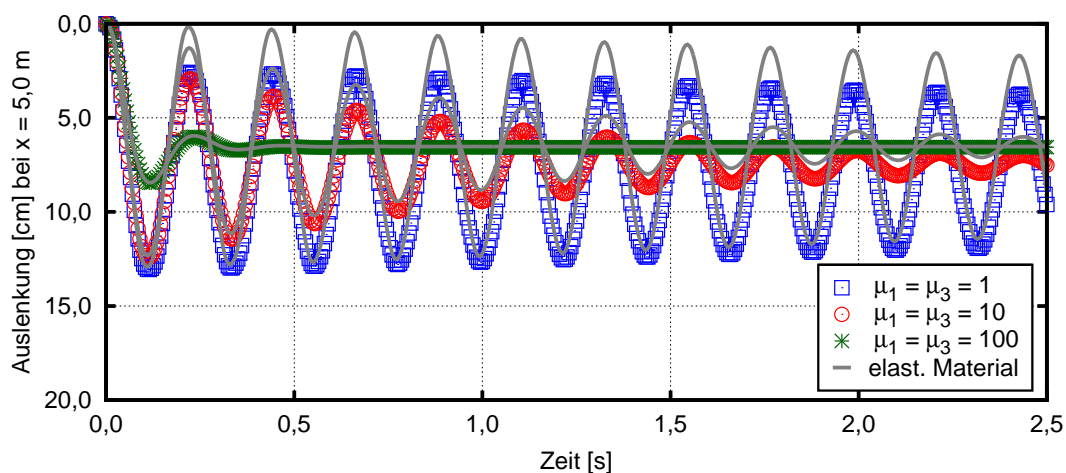


Bild 6.13: Auslenkung der Plattenunterseite bei $x = 5,0 \text{ m}$, elastisch-plastisches Materialverhalten.

Für elastisch-plastisches Materialverhalten ist die Auslenkung der Plattenunterseite den Ergebnissen der Berechnungen mit elastischem Material in Bild 6.13 vergleichend gegenüber gestellt.

Bei Fluidviskositäten von $\mu_1 = \mu_3 = \{1, 10\}$ kg/s/m sind deutliche Unterschiede im Schwingungsverhalten sichtbar. In beiden Fällen treten vor Erreichen der anfänglichen maximalen Auslenkung große Bereiche mit überschrittener Fließspannung und damit inelastischen Verzerrungen und bleibenden Verformungen an Plattenober- und -unterseite im Bereich der Einspannungen auf. Nach Erreichen der maximalen Auslenkung zu Berechnungsbeginn ist das Tragwerk verformt. Daraus resultiert das veränderte Schwingungsverhalten mit kleinerer Amplitude und um eine tiefere Ruhelage als bei elastischem Material. Die Fließspannung wird dann im Verlauf der weiteren Berechnung nicht mehr überschritten, das Spannungs-Verformungsverhalten in den Bereichen der Plastifizierung weicht jedoch deutlich vom ursprünglichen Verhalten bei rein elastischem Material ab. In Bild 6.14 ist dieses Verhalten anhand der T^{xx} -Spannungen zu den Zeitpunkten der maximalen und der darauf folgenden minimalen Auslenkung für $\mu_1 = \mu_3 = 1$ kg/s/m verdeutlicht. Nach dem Zurückschwingen treten in den Bereichen der Einspannung an Plattenunterseite Zug- und an Plattenoberseite Druckspannungen auf.

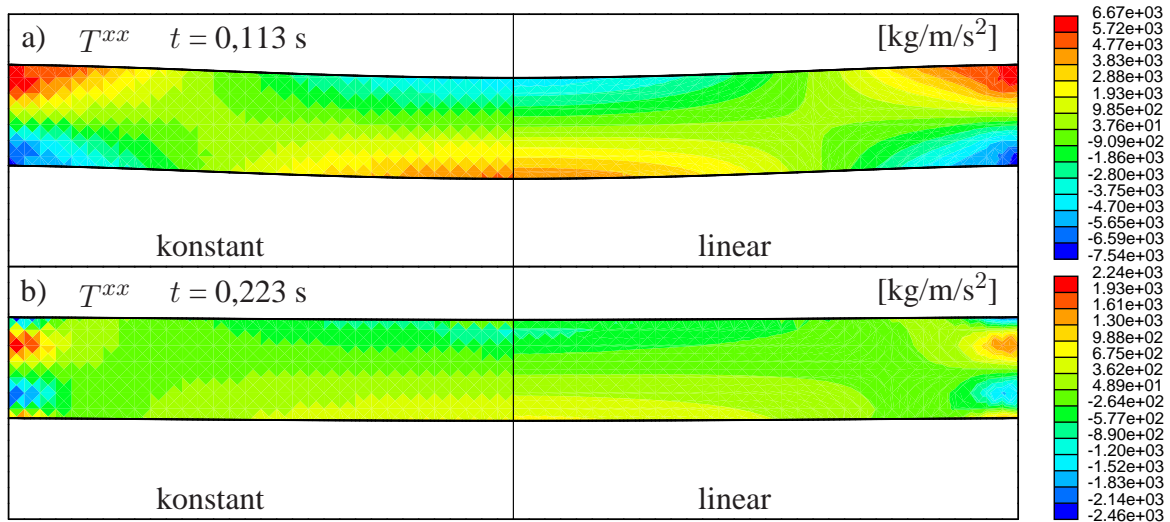


Bild 6.14: Spannungsverläufe der T^{xx} -Spannungen für $\mu_1 = \mu_3 = 1$ kg/s/m bei $t = 0,11$ s.

Bei $\mu_1 = \mu_3 = 100$ kg/s/m sind die Beanspruchungen aufgrund der großen Dämpfung deutlich geringer. Dadurch wird die Fließspannung in wesentlich kleineren Querschnittsbereichen und wesentlich kürzer überschritten, so dass die Unterschiede im Schwingungsverhalten in der gewählten Darstellung in Bild 6.13 nicht erkennbar sind.

6.6 Schüttkegel

Bei diesem Testfall wird das Verformungsverhalten eines mit der modifizierten Drucker-Prager-Fließbedingung (6.27) modellierten Bodenmaterials untersucht. Dafür ist ein Bodenkörper mit einem bestimmten Böschungswinkel α vorgegeben. Dieser stimmt jedoch nicht mit dem Winkel der inneren Reibung ϕ' überein, so dass sich das Material bei $\phi' < \alpha$ umlagert. Der initiale Zustand des Testfalles ist in Bild 6.15 gegeben.

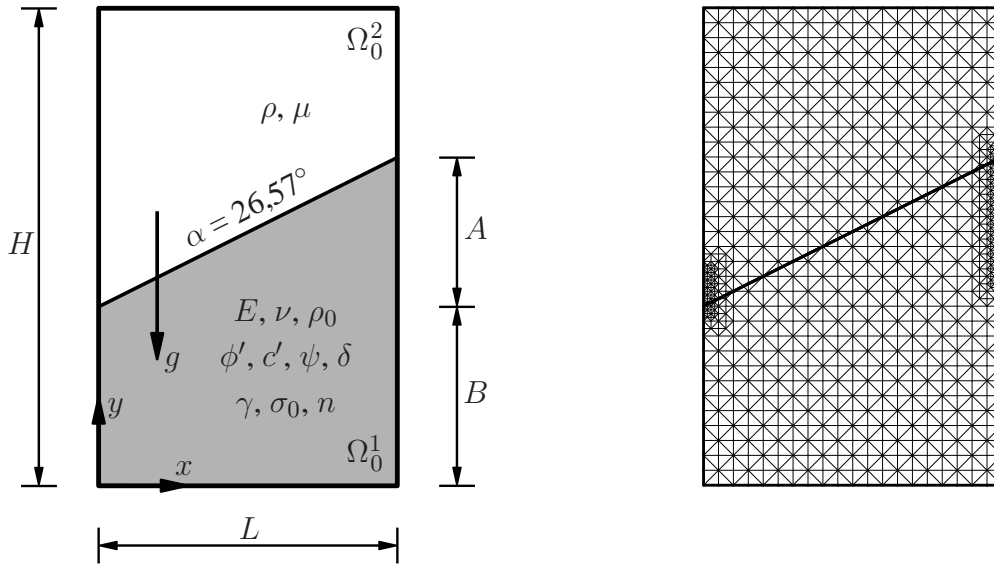


Bild 6.15: System mit anfänglicher Gebietsverteilung.

Das rechteckige Berechnungsgebiet Ω_t mit der Länge $L = 5,0$ m und der Höhe $H = 8,0$ m setzt sich aus den Teilgebieten Ω_t^1 und Ω_t^2 zusammen. Im initialen Teilgebiet Ω_0^1 befindet sich das Bodenmaterial und im initialen Teilgebiet Ω_0^2 ein umgebendes Fluid. Die Abgrenzung der Teilgebiete ist mit der Level-Set-Methodik realisiert. Mit den Abmaßen $A = 2,0$ m und $B = 3,0$ m beträgt der Böschungswinkel des Bodenkörpers im anfänglichen Berechnungsgebiet $\alpha = 26,57^\circ$. Der Elastizitätsmodul des Feststoffes ist zu $E = 1,0 \cdot 10^6$ kg/m/s² und die Querkontraktionszahl zu $\nu = 0,4$ gewählt. Die Ausgangsdichte beträgt $\rho_0 = 150,0$ kg/m³ und die massenbezogene Beschleunigung $g = 10,0$ m/s². Das Umlagerungsverhalten des Bodenmaterials ist für verschiedene Werte $\phi' = \{15, 20, 25, 30\}^\circ$ des inneren Reibungswinkels untersucht. Dafür ist der Dilatanzwinkel zu $\psi = 0^\circ$ gesetzt, so dass nach (6.38) die den Drucker-Prager-Fließkegel definierenden Werte α_f und κ_f im ebenen Verzerrungszustand gleich den Werten des Schubkegels sind, siehe auch Tabelle 6.1. Vereinfachend ist das Bodenmaterial als kohäsionslos modelliert. Damit ist zwar innerhalb des Drucker-Prager-Kegels kein Zugbereich definiert, die gewählte Überspannungsformulierung ermöglicht jedoch auch Spannungsraten im Zugbereich. Für die Abrundung der Kegelspitze in diesem Bereich ist der Faktor δ in (6.27) und (6.32) eingeführt, der im Rahmen dieses Beispiels zu $\delta = 0,01$ gesetzt ist. In der Evolutionsgleichung (6.33) ist neben der modifizierten Drucker-Prager-Fließbedingung (6.27) die Kirchhoff-Spannung $\sigma_0 = 1,0$ kg/cm/s² zur Normierung des Ausdruckes unter der Macauley-Klammer gesetzt. Die Fluidität in (6.33) ist zu $\gamma = 0,002$ m · s/kg und der Exponent zu $n = 1,0$ gewählt. Das Fluid im Teilgebiet Ω_t^2 ist als inkompressibel und linearviskos modelliert, mit der Dichte $\rho = 1,0$ kg/m³ und der Viskosität $\mu = 1,0$ kg/s/m.

Die Berechnungen sind auf der in Bild 6.15 dargestellten und in den Randbereichen verdichteten Diskretisierung mit 1770 finiten Raum-Zeit-Elementen durchgeführt. An den Seitenrändern und an der Unterseite des oben offenen Berechnungsgebietes sind Gleitrandbedingungen gesetzt. Zu Beginn der Berechnung ist das Bodenmaterial spannungslos. Da dies jedoch nicht dem realen Spannungszustand eines mit Eigengewicht belasteten Körpers entspricht, wird das Bodenmaterial im Zeitintervall $I_t = (0,10)$ s mit einer Zeitschrittweite von $\Delta t = 0,01$ s als rein elastisches Material berechnet. Die während dieses Zeitintervalls auftretenden Schwingungen des Bodenkörpers sind mit dem darüber befindlichen Fluid gedämpft. Dafür ist in den ersten vier Sekunden der Berechnung eine Fluidviskosität von $\mu = 1000,0$ kg/s/m vorgegeben, die dann innerhalb der nächsten sechs Sekunden auf den Berechnungswert abgesenkt wird. Die elastischen Spannungen im Bodenkörper zum Zeitpunkt nach $t = 10$ s sind in Bild 6.16 gezeigt.

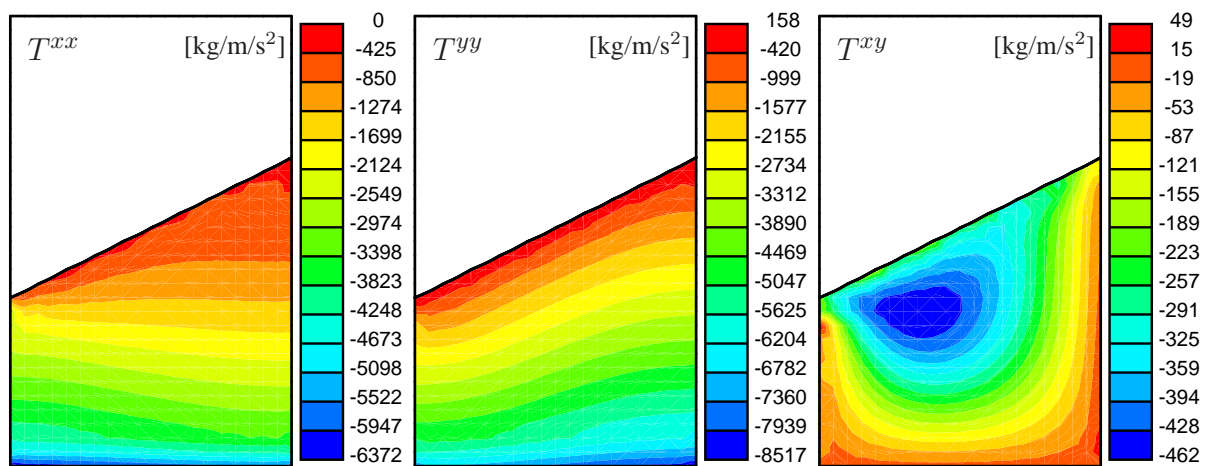


Bild 6.16: Spannungverläufe zum Zeitpunkt $t = 10$ s.

Ausgehend vom von diesem Spannungszustand erfolgt im Zeitintervall $I_t = (10,40)$ s die Berechnung der Verformung des Bodenkörpers mit elastisch-plastischem Materialgesetz. Dafür ist die Zeitschrittweite zu $\Delta t = 0,004$ s gewählt.

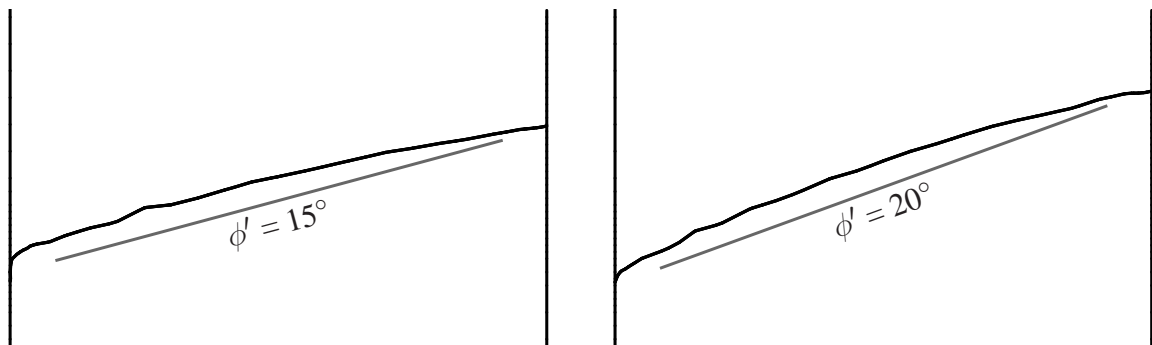


Bild 6.17: Verformtes Bodenmaterial $t = 40$ s, innere Reibungswinkel von $\phi' = 15^\circ$ und $\phi' = 20^\circ$.

In den Bildern 6.17 und 6.18 sind die Oberflächen der mit den untersuchten Reibungswinkeln berechneten Bodenmaterialien zum Zeitpunkt $t = 40$ s dargestellt. Dabei ist der jeweilige Winkel der inneren Reibung mit einer unter diesem Winkel geneigten Geraden veranschaulicht, wodurch der Vergleich mit der Neigung der Oberfläche möglich ist. Die verschobenen Oberflächen

in Bild 6.17 zeigen für Reibungswinkel von $\phi' = 15^\circ$ und $\phi' = 20^\circ$ im mittleren Hangbereich gute Näherungen an den Winkel der inneren Reibung. Im Bereich des linken Randes ist der Oberflächenwinkel jedoch größer und im Bereich des rechten Randes teilweise deutlich kleiner als der innere Reibungswinkel. Bild 6.18 zeigt die verschobenen Oberflächen für $\phi' = 25^\circ$ und $\phi' = 30^\circ$. Während die Oberflächenneigung bei $\phi' = 25^\circ$ sehr gut mit dem Winkel der inneren Reibung übereinstimmt und lediglich im rechten Bereich kleiner ist, treten bei $\phi' = 30^\circ$ keine wesentlichen Verformungen auf, da der Oberflächenwinkel kleiner ist als der innere Reibungswinkel.

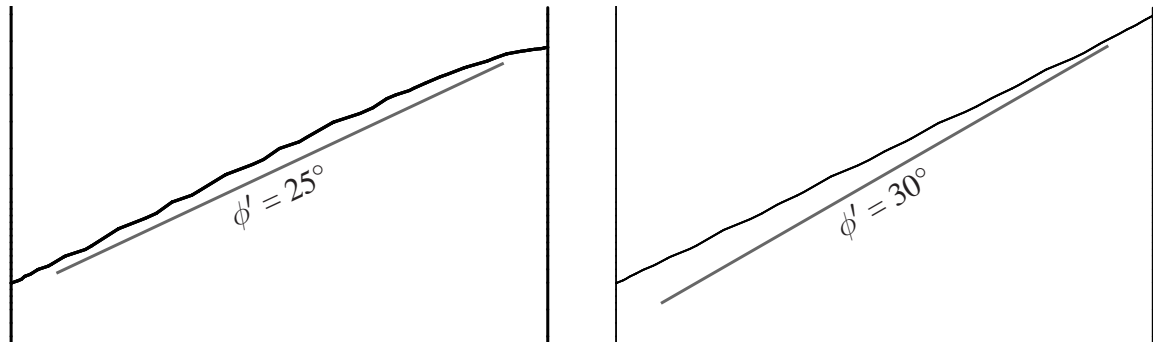


Bild 6.18: Verformtes Bodenmaterial $t = 40$ s, innere Reibungswinkel von $\phi' = 25^\circ$ und $\phi' = 30^\circ$.

In Bild 6.19 sind die Dichteverläufe der umgelagerten Bodenmaterialien mit den inneren Reibungswinkeln $\phi' = 15^\circ$, $\phi' = 20^\circ$ und $\phi' = 25^\circ$ zum Zeitpunkt $t = 40$ s dargestellt.

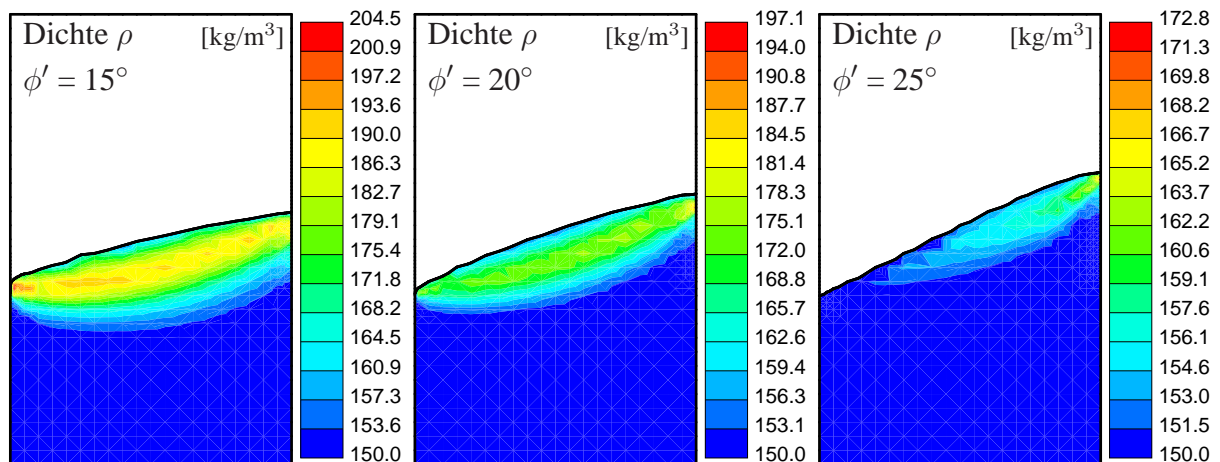


Bild 6.19: Dichteverläufe der verformten Bodenmaterialien zum Zeitpunkt $t = 40,0$ s.

Obwohl die Hangneigungswinkel in Bild 6.19 gut mit den Winkeln der inneren Reibung übereinstimmen, treten in allen dargestellten Fällen Bereiche auf, in denen das Material gegenüber dem Ausgangszustand signifikant verdichtet ist. Dies entspricht jedoch nicht dem realen Verhalten von Bodenmaterialien. Hier ist das Materialgesetz dahingehend zu erweitern, dass die dichteste Lagerung des Materials vorgegeben ist und darüber hinaus auftretende Verdichtungen verhindert werden. Dafür kommen Entwicklungsgleichungen infrage, welche die Fließflächenparameter und damit die Form der Fließfläche im Sinne einer Verfestigung verändern. Diese

sollten in Abhängigkeit von der Ausgangsdichte, der aktuellen Dichte und der Packungsdichte sowie möglichen weiteren Parametern formuliert sein.

7. Drei-Fluid-Strömungen

Neben Zwei-Fluid-Strömungen sind auch Strömungen mit drei oder mehr interagierenden Fluiden oder Stoffen mit fluidähnlichem Verhalten bei vielen Prozessen in Natur und Technik von Bedeutung. In der öl- und gasfördernden Industrie z. B. treten Rohrströmungen auf, bei denen Öle, Gase und Wasser miteinander interagieren. Die adäquate Voraussage von Fließverhalten, Druckgefälle und Phasenverteilung der Dreiphasenströmungen hat signifikante Auswirkungen auf die sachgerechte Auslegung und den Betrieb von Pipelines. In der Oberflächenvorbereitung und zum Schneiden von Werkstoffen werden Kombinationen von Druckwasserstrahlen und Trockenstrahlen eingesetzt. Dabei erfolgt das Abstrahlen von Oberflächen bzw. das Schneiden von Werkstoffen mit Dreiphasenströmungen aus Feststoffpartikeln, Wasser und Luft, wodurch anwendungstechnische und qualitative Vorteile der so bearbeiteten Oberflächen und Werkstoffe entstehen. Im Rahmen der hier betrachteten fließenden granularen Bodenmaterialien treten Dreiphasenströmungen bei Interaktion fluidähnlicher Bodenkörper mit Luft und Wasser auf. Dies ist z. B. der Fall, wenn unterseeische Hangrutschungen stattfinden und Wasserwellen auslösen oder überseeische Hänge in darunter liegende Gewässer rutschen. Während unterhalb der Gewässeroberfläche stattfindende Rutschungen nicht direkt mit der Luft oberhalb der Wasseroberfläche interagieren, treten bei überseeischen Rutschungen in Gewässer während des Eintauchvorganges instationäre Dreiphasenströmungen aus Bodenmaterial, Wasser und eingetragener Luft auf. Bei entsprechenden Rutschmassen, -geschwindigkeiten und -längen können unter- und überseeische Rutschungen Tsunamis auslösen.

Im folgenden Kapitel ist die in Kapitel 5 vorgestellte und untersuchte Methodik zur Berechnung von Zwei-Fluid-Strömungen auf drei Fluide erweitert. Dafür sind in Abschnitt 7.1 zunächst verschiedene Ansätze zur Erfassung dreier nicht mischbarer Fluide mit der Level-Set-Methodik hinsichtlich ihrer Eignung zur Konstruktion erweiterter Ansätze sowie bei signifikant struktur- und gestaltändernden Teilgebieten diskutiert. Die hier verwendeten Level-Set-Funktionen sind definiert und ihre Einbindung in das Konzept der erweiterten Ansätze, insbesondere im Bereich dreier interagierender Fluide, ist gezeigt. In Abschnitt 7.2 sind Zwei-Fluid und Drei-Fluid-Formulierung anhand eines dafür speziell konstruierten Beispiels miteinander verglichen. Die Berechnung einer Hangrutschung in ein Gewässer erfolgt für ein Modellbeispiel in Abschnitt 7.3. Dafür sind unterschiedliche Materialparameter des Bodenmaterials verwendet und zwei verschiedene Szenarien anhand Auflaufhöhen und Massenerhaltung miteinander verglichen.

7.1 Erweiterung der Zwei-Fluid-Formulierung auf drei Fluide

Physikalische Prozesse mit drei interagierenden Fluiden sind gekennzeichnet durch das Auftreten von Tripelpunkten und Tripellinien (im Zweidimensionalen lediglich Tripelpunkte), an

denen alle drei Fluide zusammentreffen. Die Modellierung dort auftretender Unstetigkeiten erfordert auch an diesen ausgezeichneten Punkten und Linien die exakte Trennung der Fluide. Der für Mehrphasenprobleme z. B. in [103] verfolgte Ansatz mit gebietsweise definierten Level-Set-Funktionen und entsprechender Transportgleichung (3.17) für jede Funktion führt im Bereich der Phasengrenzflächen jedoch zu Gebieten mit überlappenden Phasen bzw. ohne eindeutige Zuordnung zu einem der Gebiete (Vakuum). Die Behebung dieser Widersprüche kann mit nachgeschalteten Projektionsmethoden erfolgen, siehe z. B. [94, 103, 131, 141]. Im Rahmen dieser Arbeit hingegen ist ein alternativer Ansatz gewählt, der jeder möglichen Grenzfläche Σ_t^{ij} , $ij = \{(12), (23), (31)\}$ eine separate Abstandsfunktion $\phi_{ij}(\mathbf{x}, t)$ zuordnet (Bild 7.1). Dies führt zu widerspruchsfreien Grenzflächen in Bereichen zweier zusammentreffender Fluide sowie zu durch den Treffpunkt der drei Nullisokonturlinien exakt lokalisierbaren Tripelpunkten. Nachteilig an diesem Ansatz ist jedoch, dass die in Bild 7.1 gestrichelt dargestellten Nullisokonturlinien der Level-Set-Funktionen keine gebietstrennende Funktion aufweisen.

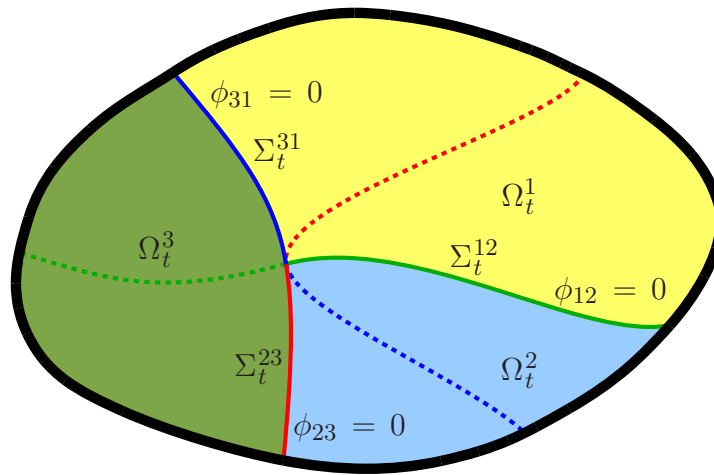


Bild 7.1: Nullisokonturen der grenzflächenzugeordneten Abstandsfunktionen.

Die Erfassung von drei oder mehr interagierenden Fluiden im Rahmen erweiterter finiter Elemente ist aufgrund bewegter Tripelpunkte und -linien nicht trivial. Ein erster Ansatz von Zlotnik & Díez [169] gründet auf zwei gleichzeitig im Berechnungsgebiet definierten Level-Set-Funktionen zur Trennung dreier unterschiedlicher Phasen. Dieser Zwei-Funktionen-Ansatz ist jedoch nicht konsistent und weist einige Nachteile gegenüber dem in dieser Arbeit vorgestellten Drei-Funktionen-Ansatz auf. Bei Verwendung dreier Level-Set-Funktionen ist die Lösung unabhängig davon, welche der Funktionen welche Fluidgebiete trennt. Mit lediglich zwei Funktionen hingegen ist diese Unabhängigkeit nicht gegeben, denn der Winkel zwischen den Fluidgebieten kann sich am Tripelpunkt nicht unabhängig einstellen. Auch die Erfassung von Einschlüssen ist nur konsistent, wenn die Bewegung jeder Grenzfläche mit einer grenzflächeneigenen Level-Set-Funktion beschrieben ist, siehe Bild 7.2 b). Bei zwei Funktionen sind Einschlüsse lediglich in zweien der drei Fluidgebiete eindeutig erfasst, wie Bild 7.2 a) zeigt. Im dritten Gebiet ist die Level-Set-Nullisokontur ohne gebietstrennende Funktion (gestrichelte Linie) an die vorhandenen Einschlüsse anzupassen. Nachteilig am Drei-Funktionen-Ansatz sind die höheren numerischen Kosten, da drei anstelle von lediglich zwei Transportgleichungen für die Level-Set-Funktionen zu lösen sind. Darüber hinaus ist zur eindeutigen Identifizierung der Fluide im Bereich von Tripelpunkten sicherzustellen, dass der Treffpunkt der Nullisokonturlinien während

der Berechnung erhalten bleibt. Diese Forderung erfüllt lediglich der Zwei-Funktionen-Ansatz in natürlicher Weise, nicht jedoch der Ansatz mit drei Level-Set-Funktionen.

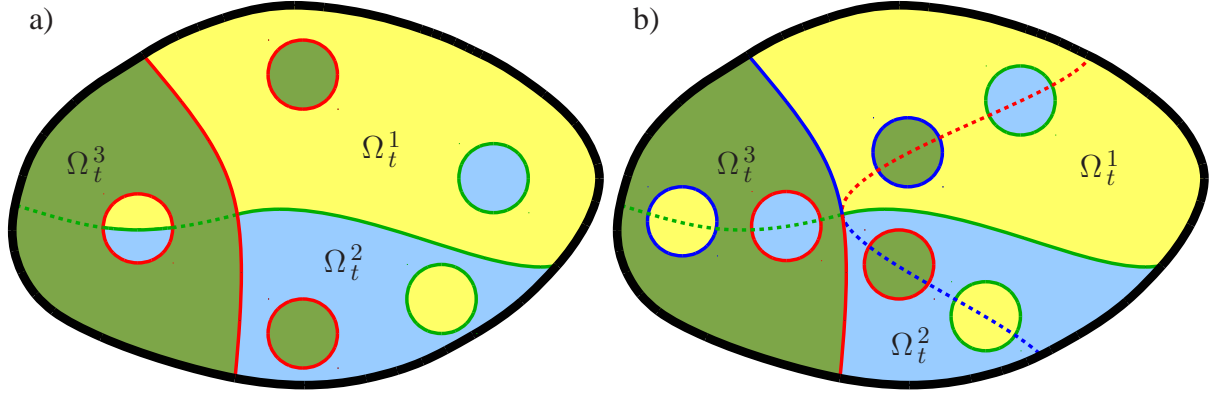


Bild 7.2: Struktur und Gestalterfassung: a) Zwei-Funktionen-Ansatz, b) Drei-Funktionen-Ansatz.

7.1.1 Definition der verwendeten Level-Set-Funktionen

Betrachtet ist das in Bild 7.1 dargestellte Gebiet Ω_t zum Zeitpunkt t , das sich aus den Subgebieten $\Omega_t^i, i = \{1, 2, 3\}$ zusammensetzt. Zur Definition vorzeichenbehafteter Abstandsfunktionen sind die Gebiete $\Omega_t^{ij} = \Omega_t^i \cup \Omega_t^j, ij = \{(12), (23), (31)\}$ definiert, die jeweils die Grenzflächen $\Sigma_t^{ij} = \overline{\Omega}_t^i \cap \overline{\Omega}_t^j$ beherbergen. Die Abstandsfunktionen folgen dann mit

$$\phi_{ij}(\mathbf{x}, t) = \pm \min \text{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_\Sigma) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_t^{ij}, \quad \forall \mathbf{x}_\Sigma \in \Sigma_t^{ij} \quad (7.1)$$

analog zu (3.13), mit dem kürzesten Abstand eines beliebigen Gebietpunktes $\mathbf{x} \in \Omega_t^{ij}$ zu den Grenzflächenpunkten $\mathbf{x}_\Sigma \in \Sigma_t^{ij}$. Die Indizes stehen für die voneinander zu trennenden Gebiete, während die Reihenfolge der Indizes das Vorzeichen der Abstandsfunktionen festlegt,

$$\text{sign}(\phi_{ij}) = \begin{cases} -1 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_t^i \\ +1 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_t^j \end{cases} \quad (7.2)$$

Im dritten Gebiet $\Omega_t^k, k \neq i, j$ nimmt $\phi_{ij}(\mathbf{x}, t)$ abhängig von der Lage der Nullisokonturlinie beide Vorzeichen an. Die gebietsweise definierten Vorzeichen sind in Tabelle 7.1 angegeben.

Gebiet	$\text{sign}(\phi_{12})$	$\text{sign}(\phi_{23})$	$\text{sign}(\phi_{31})$
Ω_t^1	-1	± 1	+1
Ω_t^2	+1	-1	± 1
Ω_t^3	± 1	+1	-1

Tabelle 7.1: Vorzeichen der Abstandsfunktionen in den jeweiligen Gebieten.

Da $\phi_{ij}(\mathbf{x}, t)$ in Ω_t^k keine gebietstrennende Funktion aufweist, wird die Level-Set-Funktion $\phi_{ij}(\mathbf{x}, t)$ dort als arithmetisches Mittel der Funktionen $\phi_{jk}(\mathbf{x}, t)$ und $\phi_{ki}(\mathbf{x}, t)$ eingestellt.

7.1.2 Anreicherungskonzept

Bei Interaktion dreier Fluide erfordert die Beschreibung der Bewegung von Grenzflächen mit der vorgestellten Methodik das gleichzeitige Lösen dreier Level-Set-Gleichungen. Analog zur Interaktion zweier Fluide fließen Lösungsinformationen aus den Level-Set-Gleichungen in die erweiterten Ansätze ein. Damit erfolgt die Erfassung von Lösungsunstetigkeiten dreier Grenzflächen mit drei angereicherten Ansatzfunktionen in den erweiterten Ansätzen der XFEM (4.5). Entsprechend wird eine beliebige grenzflächenunstetige Beschreibungsgröße $u(\mathbf{x}, t)$ mit

$$\begin{aligned} u_{\text{ext}}^h(\mathbf{x}, t) = & \sum_{i \in \mathcal{N}^{\text{std}}} N_i(\mathbf{x}, t) \hat{u}_i + \sum_{j \in \mathcal{N}_{12}^{\text{ext}}} N_j(\mathbf{x}, t) \psi_j^{12}(\mathbf{x}, t) \hat{a}_j^{12} \\ & + \sum_{k \in \mathcal{N}_{23}^{\text{ext}}} N_k(\mathbf{x}, t) \psi_k^{23}(\mathbf{x}, t) \hat{a}_k^{23} + \sum_{l \in \mathcal{N}_{31}^{\text{ext}}} N_l(\mathbf{x}, t) \psi_l^{31}(\mathbf{x}, t) \hat{a}_l^{31} \end{aligned} \quad (7.3)$$

approximiert. Darin ist \mathcal{N}^{std} die Menge der Knoten der Diskretisierung und $\mathcal{N}_{12}^{\text{ext}}$, $\mathcal{N}_{23}^{\text{ext}}$, $\mathcal{N}_{31}^{\text{ext}}$ sind Knotenuntermengen, die jeweils zu den von den Grenzflächen R_n^{12} , R_n^{23} , R_n^{31} der Raum-Zeit-Scheibe Q_n geschnittenen finiten Elementen gehören. Bild 7.3 verdeutlicht die grenzflächenspezifische Wahl anzureichernder Knoten einer gegebenen Raum-Zeit-Diskretisierung.

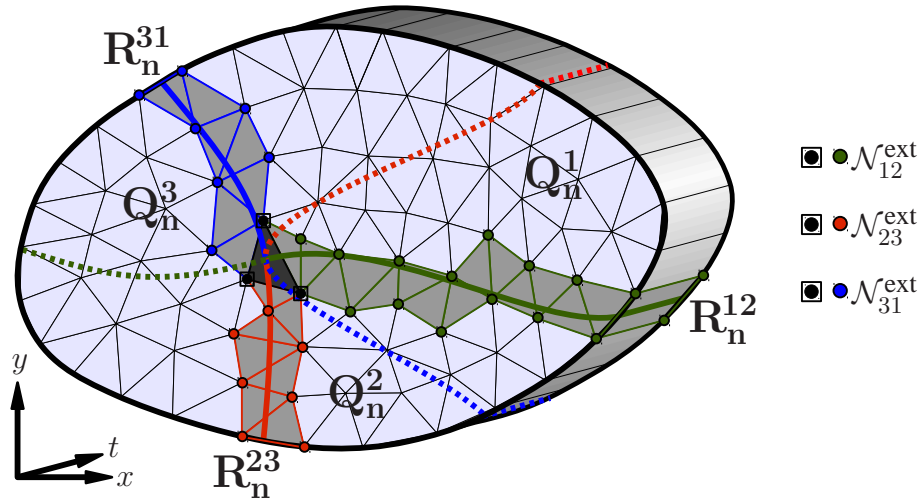


Bild 7.3: Grenzflächenspezifische Identifizierung anzureichernder Knoten der Raum-Zeit-Scheibe Q_n .

Wie bisher sind die knotenweise definierten Anreicherungsfunktionen $\psi^{ij}(\mathbf{x}, t)$ der Grenzflächen R_n^{ij} in entsprechendem Abstand von Tripelpunkten unter Verwendung der jeweiligen Level-Set-Funktion $\phi_{ij}(\mathbf{x}, t)$ zu konstruieren. In unmittelbarer Umgebung von Tripelpunkten stehen jedoch drei Level-Set-Funktionen zur Konstruktion von Anreicherungen zur Verfügung. Da die Anreicherungsfunktionen $\psi^{ij}(\mathbf{x}, t)$ jedoch lediglich für die beiden von der entsprechenden Grenzfläche getrennten Fluide in den Gebieten Q_n^i und Q_n^j auszuwerten sind, werden zusätzliche “Ausschaltfunktionen” konstruiert, die gebietsabhängig Werte von Null und Eins annehmen, um Anreicherungen dort auszuschalten, wo sie nicht benötigt sind. Nachfolgend ist die Konstruktion einer solchen Funktion für $\psi^{12}(\mathbf{x}, t)$ gezeigt. Der Ausdruck

$$f_{12} = 2 - \text{sign}(\phi_{23}) + \text{sign}(\phi_{31}) \quad (7.4)$$

nimmt mit den in Tabelle 7.1 angegebenen Werten im Gebiet Q_n^3 den Wert Null und in den Gebieten Q_n^1 und Q_n^2 Werte ungleich Null an. Nach Normierung f_{12}/f_{12} und Addition der Dirac-Delta-Funktion $\delta(f_{12})$ im Nenner der normierten Funktion ist die gesuchte Ausschaltfunktion

$$\eta_{12} = \frac{f_{12}}{f_{12} + \delta(f_{12})} \quad \text{mit den Werten} \quad \eta_{12} = \begin{cases} 1 & \text{in } Q_n^1, Q_n^2 \\ 0 & \text{in } Q_n^3 \end{cases} \quad (7.5)$$

gegeben. Damit nimmt die am Knoten k definierte Anreicherungsfunktion $\psi_k^{12}(\mathbf{x}, t)$ für Elemente mit Tripelpunkt im Elementgebiet und unter Verwendung von (4.16) und (7.5) die Form

$$\psi_k^{12}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(1 - \text{sign}(\phi_{12}) \text{sign}(\phi_{12})_k \right) (\eta_{12}) (\eta_{12})_k \quad (7.6)$$

an. Anreicherungsfunktion (7.6) ist konsistent, da die Anreicherungsweite einer Auswertung von (7.6) in den Gebieten Q_n^1 und Q_n^2 aufgrund der speziell konstruierten Eigenschaft (7.5) mit den Anreicherungsweiten einer Auswertung von (4.16) mit $\phi_{12}(\mathbf{x}, t)$ identisch sind.

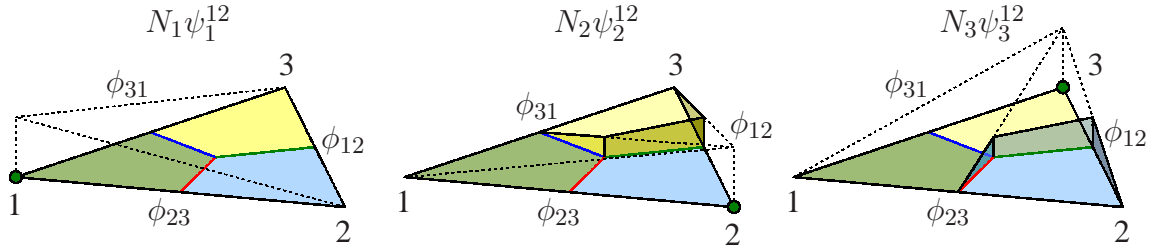


Bild 7.4: Angereicherte Ansatzfunktionen $N_k \psi_k^{12}$ im Dreieckselement mit Tripelpunkt.

Bild 7.4 zeigt beispielhaft die mit den Anreicherungsfunktionen (7.6) gebildeten angereicherten Ansatzfunktionen für ein Dreieckselement mit Tripelpunkt im Elementgebiet. Die Ausdrücke

$$f_{23} = 2 - \text{sign}(\phi_{31}) + \text{sign}(\phi_{12}) \quad \text{und} \quad f_{31} = 2 - \text{sign}(\phi_{12}) + \text{sign}(\phi_{23}) \quad (7.7)$$

dienen analog zu (7.5) der Bildung der Ausschaltfunktionen η_{23} und η_{31} . Die jeweiligen Anreicherungsfunktionen für die Level-Set-Funktionen $\phi_{23}(\mathbf{x}, t)$ und $\phi_{31}(\mathbf{x}, t)$ am Knoten k lauten

$$\psi_k^{23}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(1 - \text{sign}(\phi_{23}) \text{sign}(\phi_{23})_k \right) (\eta_{23}) (\eta_{23})_k, \quad (7.8)$$

$$\psi_k^{31}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(1 - \text{sign}(\phi_{31}) \text{sign}(\phi_{31})_k \right) (\eta_{31}) (\eta_{31})_k. \quad (7.9)$$

Die mit den Anreicherungsfunktionen (7.6), (7.8) und (7.9) gebildeten Ansätze (7.3) erlauben die Modellierung stark unstetiger Lösungsverläufe über die Grenzflächen dreier Fluide. Schwach unstetige Lösungsverläufe werden mit Nitsche's Methode erzwungen.

Anmerkung. Die vorgestellte Anreicherungsmethodik kann als versetzte Version der von Simone et al. [139] vorgeschlagenen Heaviside-Anreicherung für Tripelpunkte angesehen werden. Im Gegensatz zu [139], deren Anreicherung auf nicht versetzten, gebietsweise definierten Heaviside-Funktionen gründet, ist der Ausgangspunkt der hier vorgestellten Anreicherung die versetzte Signum- bzw. Heaviside-Funktion (4.16). Zur effektiven Nutzung dieser Anreicherungen, auch in der Umgebung von Tripelpunkten, sind Ausschaltfunktionen η_{ij} definiert, die den

versetzten Heaviside-Funktion $\eta_{ij} = 1 - H_k$ für das verbleibende dritte Gebiet $Q_n^k, k \neq i, j$ entsprechen und mit der jeweiligen Signumfunktion multipliziert sind. Einige der verfügbaren Heaviside-Funktionen sind in [139] nicht berücksichtigt, um lineare Abhängigkeiten zu vermeiden. Diese Nichtberücksichtigung erfolgt hier durch nochmalige Multiplikation der entsprechenden Signumfunktion mit dem Knotenwert der Ausschaltfunktion des betrachteten Knotens.

7.1.3 Erhaltung von Tripelpunkten

Ein Tripelpunkt ist als der Punkt approximiert, an dem die drei Nullniveaulinien der Level-Set-Funktionen zusammentreffen. Da die Lösung der Level-Set-Gleichungen jedoch unabhängig voneinander erfolgt, weichen die Schnittpunkte der einzelnen Nullniveaumengen nach dem raumzeitlichen Level-Set-Transport im Allgemeinen voneinander ab, so dass drei Kreuzungspunkte entstehen, siehe Bild 7.5. Damit sind aber die einzelnen Raum-Zeit-Gebiete in diesen Bereichen nicht exakt voneinander getrennt, wodurch XFEM-Techniken nicht geeignet anwendbar sind. Zur Behebung dieses Fehlers ist die Lösung der Level-Set-Gleichungen im Bereich degenerierter Tripelpunkte so anzupassen, dass diese wieder hergestellt werden. Dafür ist ein einfacher Algorithmus zu Beginn und Ende jeder Raum-Zeit-Scheibe angewendet. Nachdem alle einander zugeordneten Kreuzungspunkte im Bereich degenerierter Tripelpunkte identifiziert sind, bilden diese aufgrund linearer Level-Set-Ansätze im räumlichen Dreieckselement ein Kreuzungsdreieck $\triangle ABC$, wie in Bild 7.5 dargestellt. Der neue Tripelpunkt ist dann als der Punkt gewählt, der die gleichen Abstände zu den Level-Set-Nullniveaulinien aufweist und damit dem Mittelpunkt S des Inkreises des Kreuzungsdreieckes entspricht. Entsprechend ist der Abstand aller Nullisokonturen zum neuen Tripelpunkt gleich dem Radius r des Inkreises. Nach Identifizierung neuer Tripelpunkte ist die aktuelle Lösung der Raum-Zeit-Elemente, die diese Punkte beinhalten, zu Beginn und Ende einer Zeitscheibe anzupassen. Dafür wird der aktuelle Wert der Level-Set-Funktionen am geometrischen Ort eines Tripelpunktes zu den Knotenwerten der jeweiligen Level-Set-Funktionen des räumlichen Dreieckselementes hinzuaddiert. Diese Vorgehensweise entspricht der Parallelverschiebung der Level-Set-Nullniveaulinien, die sich danach am Ort des neuen Tripelpunktes schneiden.

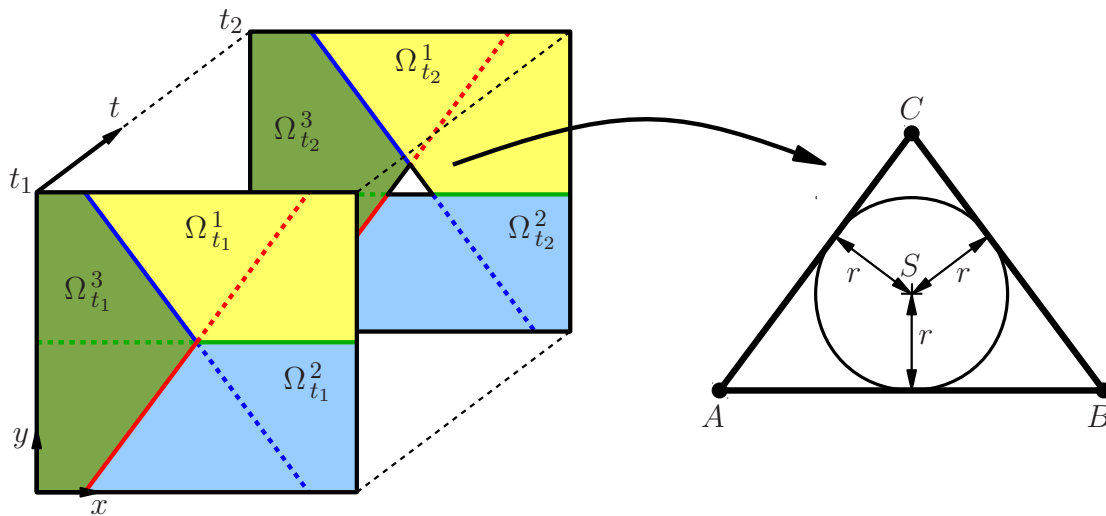


Bild 7.5: Degenerierter Tripelpunkt nach Transport und Inkreis des Kreuzungsdreieckes $\triangle ABC$.

7.2 Struktur- und Gestaltänderung

Bei diesem Testfall wird die vorgestellte Methodik zur Beschreibung der Interaktion von drei bewegten Phasen anhand dreier nicht mischbarer inkompressibler linear-viskoser Fluide untersucht. Ausgangskonfiguration der Berechnung ist der in Bild 7.6 a) dargestellte quadratische Behälter mit den Seitenabmessungen $D = 100$ cm. Darin befinden sich die drei Fluide in den initialen Subgebieten Ω_0^i , $i = \{1, 2, 3\}$. Die Materialparameter der Fluide in den Gebieten Ω_t^1 und Ω_t^3 sind mit $\rho_1 = \rho_3 = 1$ g/cm³ und $\mu_1 = \mu_3 = 20$ g/s/cm identisch gewählt, während sie mit $\rho_2 = 10^{-3}$ g/cm³ und $\mu_2 = 10^{-1}$ g/s/cm für Fluid 2 im Gebiet Ω_t^2 davon abweichen. An den seitlichen Behälterwänden und am Behälterboden sind Gleitrandbedingungen angenommen, an der offenen oberen Behälterseite ist das Druckniveau zu $p = 0$ kg/cm/s² gesetzt. Die Subgebiete Ω_0^1 und Ω_0^3 sind zum Ausgangszeitpunkt kreisförmig in den unteren beiden Ecken des Behälters angeordnet. Die Mittelpunkte der Kreise befinden sich in den unteren Behälterecken, der Radius beträgt jeweils $R = 45$ cm. Unter Einfluss der Gravitation $g = 100$ cm/s² strömen die Fluide 1 und 3 in Richtung der vertikalen Symmetrieachse des Behälters und schwappen dort zusammen. Regularisierende Effekte aus Oberflächenspannungen sind vernachlässigt.

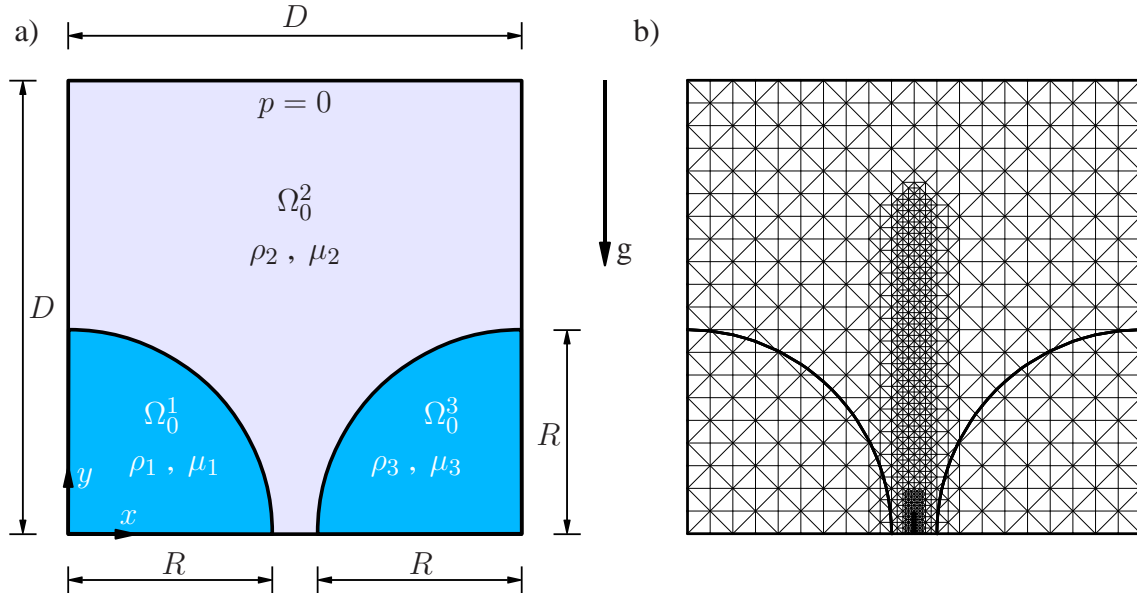
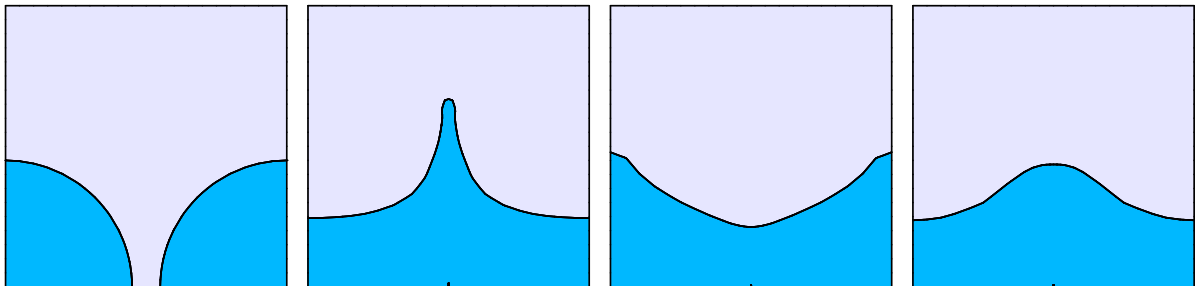


Bild 7.6: System mit initialer Gebietsverteilung und Diskretisierung.

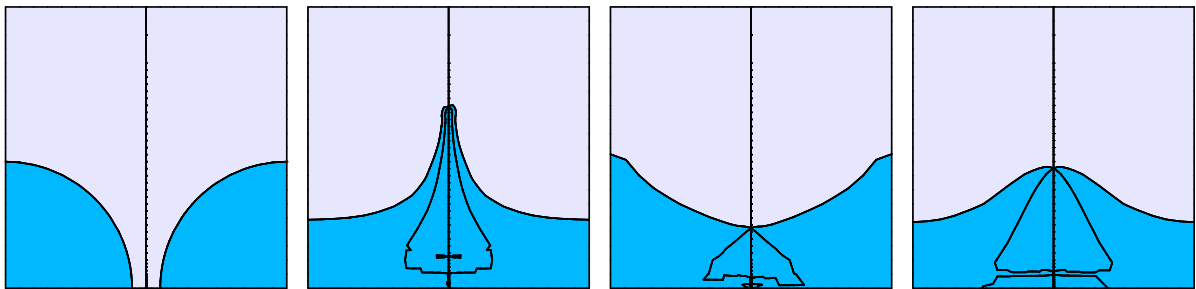
Der betrachtete Testfall ist so konzipiert, dass er sich sowohl zur Berechnung von zwei Fluiden, als auch von drei Fluiden eignet. Bei der Zwei-Fluid-Formulierung verändert sich nach dem Zusammenschwappen der Fluide 1 und 3 die Gestalt der Gebiete Ω_t^1 und Ω_t^3 dahingehend, dass diese in einem gemeinsamen Gebiet aufgehen, welches dann nur noch eine gemeinsame Grenzfläche mit Gebiet Ω_t^2 besitzt. Im Gegensatz dazu bleiben die Gebiete bei der Drei-Fluid-Formulierung auch nach dem Zusammenschwappen der Fluide entlang der vertikalen Symmetrieachse voneinander getrennt. Damit kann die Lösung der Berechnung mit der in Kapitel 5 verifizierten Zwei-Fluid-Formulierung als Referenzlösung für die Berechnung mit der Drei-Fluid-Formulierung herangezogen werden. Beide Rechnungen sind auf der in Bild 7.6 b) dargestellten und im Bereich der vertikalen Symmetrieachse verdichteten Diskretisierung mit 2052 finiten Raum-Zeit-Elementen durchgeführt. Die Berechnungen erfolgen für das Zeitintervall $I_t = (0,5)$ s. Die Zeitschrittweite ist zu $\Delta t = 0,005$ s gewählt.

Die Ergebnisse beider Simulationen sind in Bild 7.7 dargestellt. Bilderreihen a) und b) zeigen die Simulationsergebnisse der Berechnungen mit den Nullisokonturlinien der jeweiligen Level-Set-Funktionen zu verschiedenen Zeitpunkten. In Bilderreihe c) sind die Simulationsergebnisse der Drei-Fluid-Formulierung anschaulicher mit den voneinander getrennten Fluidphasen anstelle der Nullisokonturlinien der Level-Set-Funktionen dargestellt und in Bilderreihe d) sind beide Simulationen direkt miteinander verglichen. Dafür ist die Fluidphasendarstellung der Drei-Fluid-Formulierung gewählt, der die Nullisokonturlinien der Level-Set-Funktionen der Zwei-Fluid-Formulierung überlagert sind.

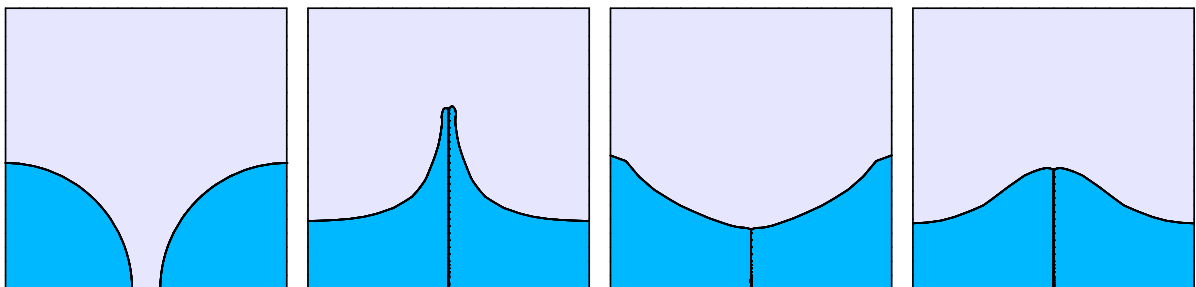
a) Zwei Fluide



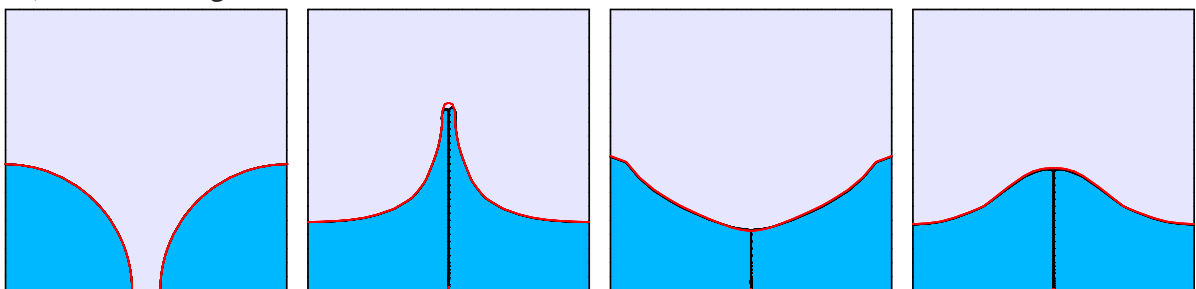
b) Drei Fluide – Level-Set-Darstellung



c) Drei Fluide – Fluidphasendarstellung



d) Direkter Vergleich



$t = 0,00 \text{ s}$

$t = 1,35 \text{ s}$

$t = 2,75 \text{ s}$

$t = 4,20 \text{ s}$

Bild 7.7: Struktur- und Gestaltänderung: Vergleich von Zwei- und Drei-Fluid-Formulierung.

Beide Simulationen zeigen sehr gute Übereinstimmung. Lediglich zum Zeitpunkt $t = 1,35$ s weist die Zwei-Fluid-Formulierung einen Wellenberg auf, der mit der Drei-Fluid-Formulierung aufgrund der lokal deutlich gekrümmten Grenzfläche nicht exakt abgebildet werden kann. In entsprechender Entfernung vom Tripelpunkt stimmen die Ergebnisse beider Simulationen zu allen berechneten Zeitpunkten jedoch sehr gut überein. Zum weiteren Vergleich der numerischen Berechnungen wird der relative Massefehler

$$E_{\text{vol}} = \frac{V_t^{\text{num}} - V_0}{V_0} \quad (7.10)$$

herangezogen. Darin ist V_t^{num} das Volumen eines Fluids oder mehrerer Fluide zur Zeit t und V_0 das entsprechende Ausgangsvolumen. Im Rahmen dieses Testfalles sind die Massen der Fluide in den Subgebieten Ω_t^1 und Ω_t^3 betrachtet. Die Entwicklung des relativen Massefehlers beider Simulationen ist für das berechnete Zeitintervall in Bild 7.8 dargestellt.

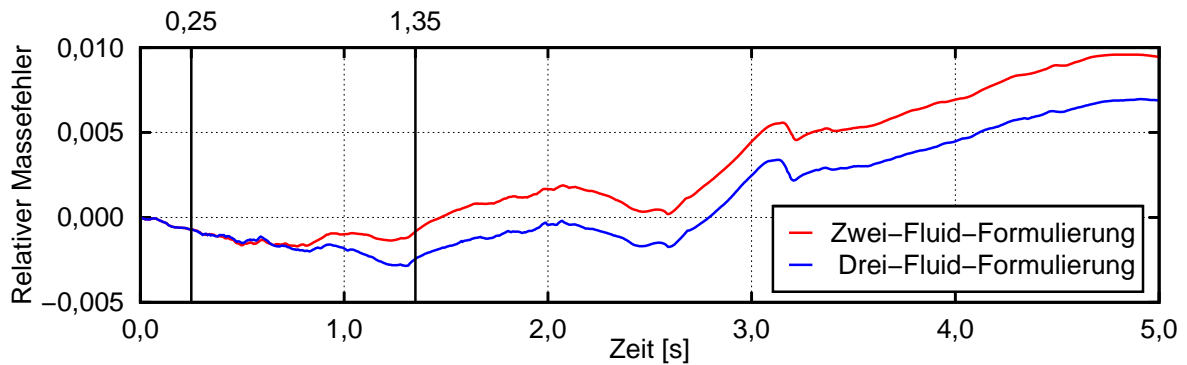


Bild 7.8: Zeitliche Entwicklung des relativen Massefehlers bei Zwei- und Drei-Fluid-Formulierung.

Zu Beginn der Berechnung unterscheiden sich beide Simulationen bezüglich der Massenerhaltung nicht wesentlich und auch nach dem Zusammentreffen der Fluide am Behälterboden nach ca. 0,25 s sind die Unterschiede nicht signifikant. Bild 7.9 zeigt, dass die Grenzflächenlagen beider Formulierungen nach dem Zusammenschwappen bei $t = 0,50$ s lediglich moderate Abweichungen aufweisen. Die Unterschiede nehmen jedoch mit aufsteigender Fluidsäule zu und haben sich im Wesentlichen bei Erreichen des höchsten Punktes des Wellenberges nach $t = 1,35$ s ausgebildet. Danach ist die Entwicklung des Massefehlers beider Simulationen bis zum Ende des Zeitintervalls relativ identisch und er beträgt bei $t = 5,0$ s weniger als 1%.

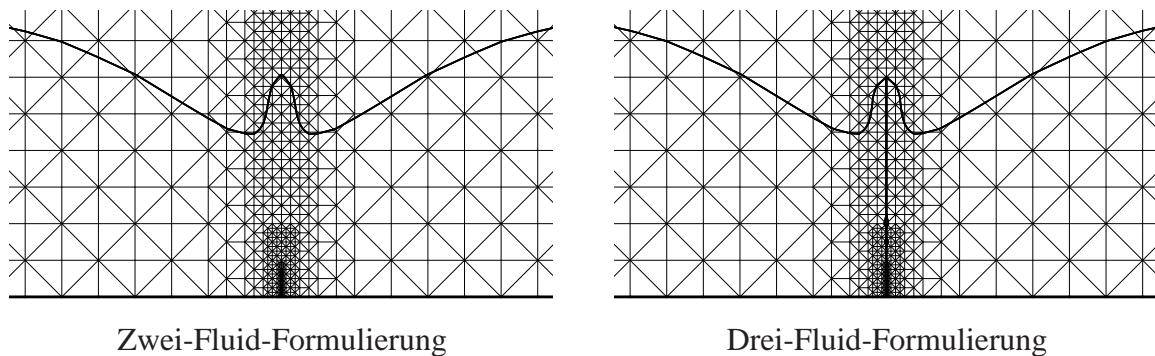


Bild 7.9: Grenzflächenlage beider Formulierungen nach dem Zusammenschwappen bei $t = 0,50$ s.

7.3 Hangrutschung

Bei diesem Testfall wird die Modellsituation der Hangrutschung eines Bodensegmentes in Interaktion mit der umgebenden Luft und einem Gewässer am Grunde des Hanges untersucht. Dabei ist hier lediglich die Nachversagensdynamik und nicht der Versagensprozess zur Ausbildung des Bodensegmentes von Interesse. Die Berechnung zeigt grundsätzliche Möglichkeiten des entwickelten Modells auf. Im zweidimensionalen Modellbeispiel rutscht das anfangs dreieckförmige Bodensegment (bei ausgebildeter Scherfuge) infolge konstanter Erdbeschleunigung $g = 981 \text{ cm/s}^2$ die Böschung hinunter. Zu Beginn der Rutschung erfährt das Segment große Deformationen und zieht sich in die Länge. Beim Auftreffen auf den Wasserkörper bilden sich Wasserwellen aus, die auf der Gegenseite des Gebietes bis zu einer bestimmten Höhe auflaufen. Bild 7.10 zeigt Ausgangskonfiguration und gewählte Diskretisierung des Systems.

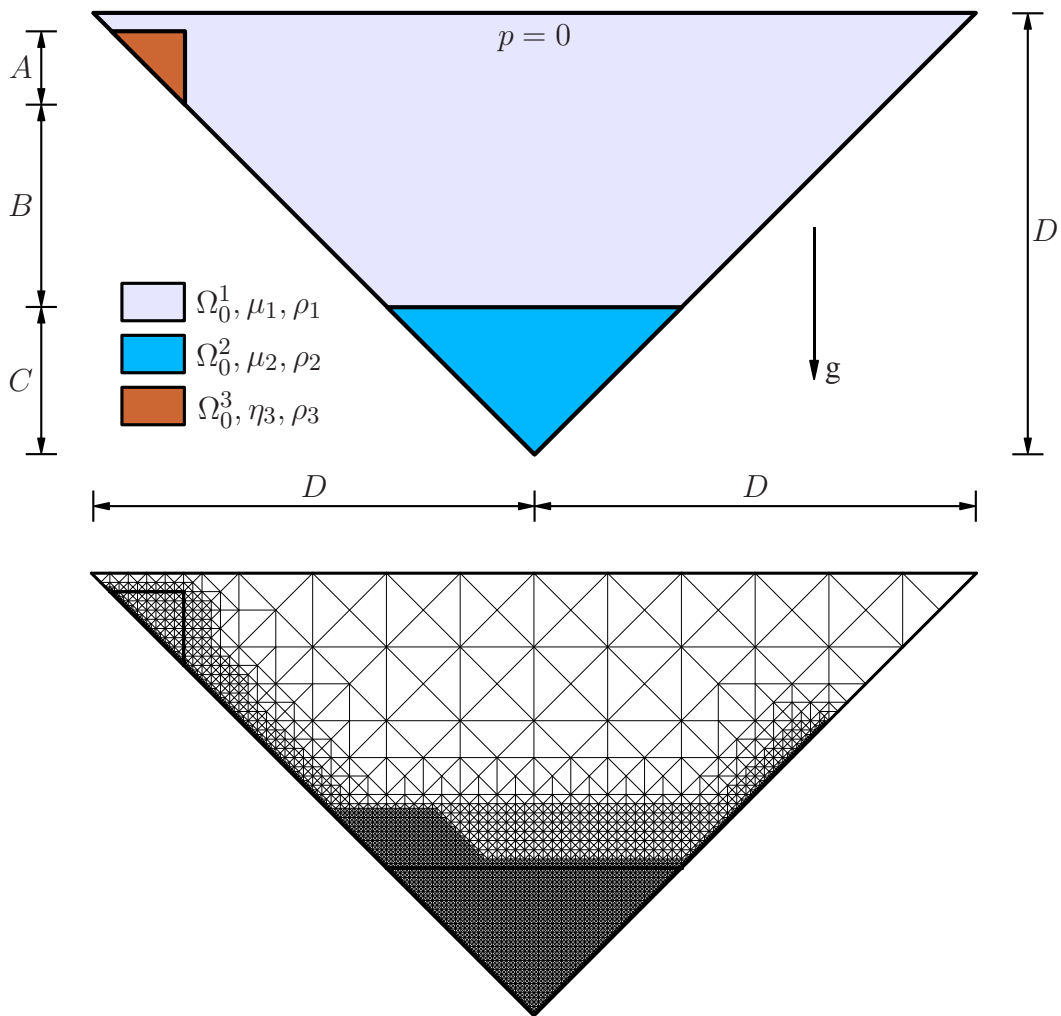


Bild 7.10: Hangrutschung, System mit initialer Gebietsverteilung und Diskretisierung.

Entlang der Behälterseiten mit den Längen $D = 60/\sqrt{2} \text{ cm}$ sind Gleitrandbedingungen angenommen und am oberen Behälterrand ist das Druckniveau zu Null gesetzt. Die charakteristische Abmessung des Bodensegmentes zu Beginn der Simulation ist zu $A = 10/\sqrt{2} \text{ cm}$ gewählt, die Höhe des Bodensegmentes über dem darunter liegenden Gewässer zu $B = 27,5/\sqrt{2} \text{ cm}$.

Die Höhe des Gewässerspiegels über dem Treffpunkt der schrägen Behälterseiten beträgt $C = 20/\sqrt{2}$ cm. Die Materialien in den initialen Gebieten Ω_0^1 und Ω_0^2 sind als linear-viskose Fluide mit den dynamischen Viskositäten $\mu_1 = \mu_2 = 10^{-2}$ g/s/cm und den Materialdichten $\rho_1 = 10^{-3}$ g/cm³ und $\rho_2 = 1$ g/cm³ modelliert. Es sind gleiche dynamische Viskositäten von Luft und Wasser angesetzt, um wesentlich feinere Diskretisierungen im Bereich der Luft zu vermeiden. Das abrutschende Bodenmaterial im initialen Gebiet Ω_0^3 ist in verschiedenen Modellrechnungen als Newton'sches Fluid sowie als Herschel-Bulkley-Fluid beschrieben. Die verwendeten Modellparameter der Newton'schen Fluide sind frei gewählt, während die Modellparameter der Herschel-Bulkley-Fluide für Kaolinit-Suspensionen [69] entnommen und für die untersuchten Suspensionen mit unterschiedlichen Feststoffkonzentrationen c_v in Tabelle 7.2 aufgeführt sind.

Fall	c_v	ρ	τ^0	m	n
	(%)	(g/cm ³)	(g/s ² /cm)	(g/s ²⁻ⁿ /cm)	
1	–	1,400	0,0	10,0	1,0
2	–	1,400	0,0	100,0	1,0
3	17,11	1,282	64,0	64,0	0,29
4	22,13	1,365	178,6	213,0	0,24

Tabelle 7.2: Modellparameter für die untersuchten Rutschungen.

Die Simulation erfolgt auf der in Bild 7.10 dargestellten Diskretisierung mit 9334 finiten Raum-Zeit-Elementen im Zeitintervall $I_t = (0,1)$ s. Die gewählte Zeitschrittweite ist an die Komplexität der Dynamik angepasst und zwischen $\Delta t = 0,5$ ms (Rutschung) und $\Delta t = 0,05$ ms (Eintauchen) gewählt. Zu Beginn der Rutschung gewinnt die Front des Segmentes schneller an Geschwindigkeit als die Rückseite, wodurch sich das Bodenmaterial in die Länge zieht. Die Ergebnisse der Simulationen zum Zeitpunkt $t = 0,23$ s sind für die in Tabelle 7.2 aufgeführten Bodenmaterialien kurz vor dem Eintauchen in das Gewässer in Bild 7.11 dargestellt.

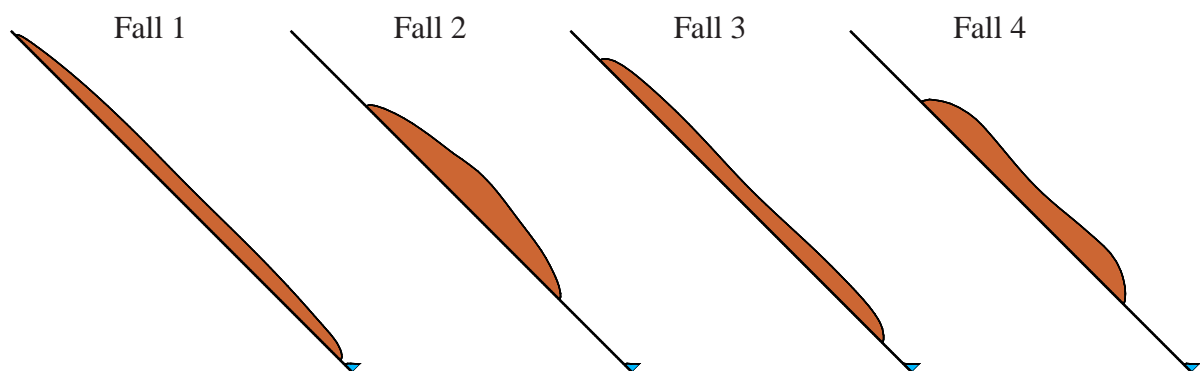
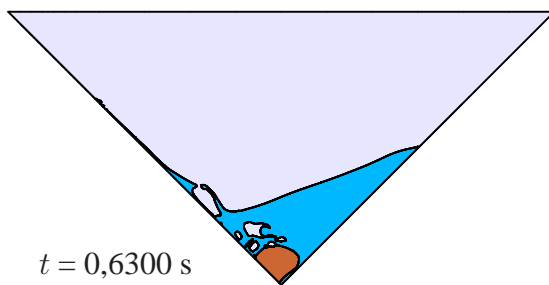
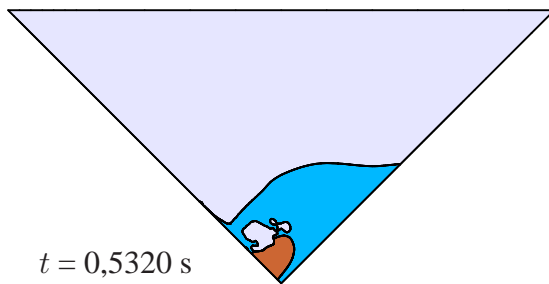
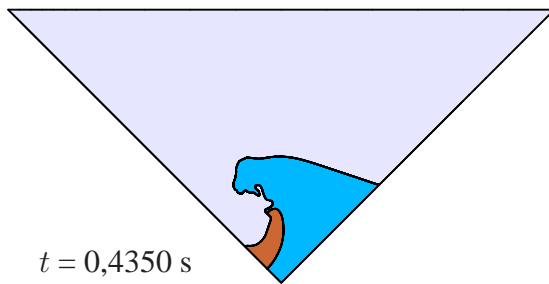
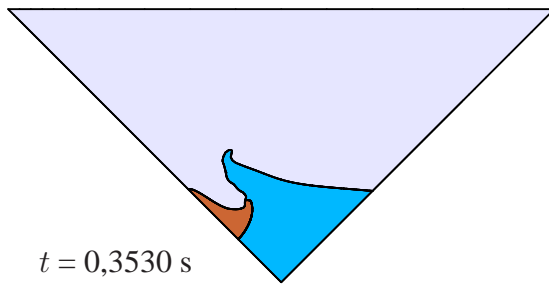
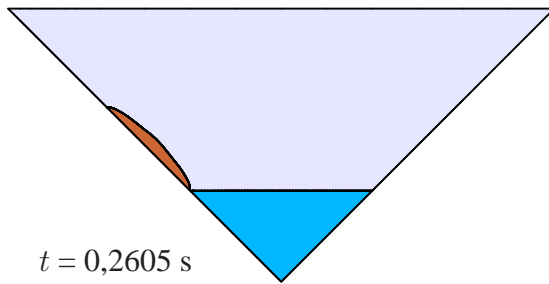


Bild 7.11: Kinematisches Bodensegment mit verschiedenen Materialparametern, $t = 0,23$ s.

Die Newton'schen Fluide der Testfälle 1 und 2 weisen nahezu gleichmäßiges Verformungsverhalten auf, während die Geometrie der Herschel-Bulkley-Fluide der Testfälle 3 und 4 das plastische Materialverhalten widerspiegelt. In den Bereichen von Front und Rückseite des Bodensegmentes treten kleinere Scherverzerrungsraten auf als im mittleren Bereich. Somit ist mit Bild 2.2 die Viskosität in Segmentmitte am kleinsten und die Verformungen sind dort am größten.

Fall 2



Fall 4

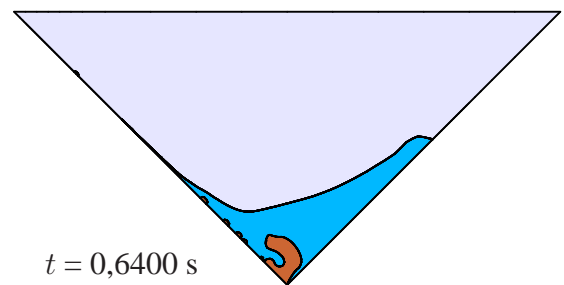
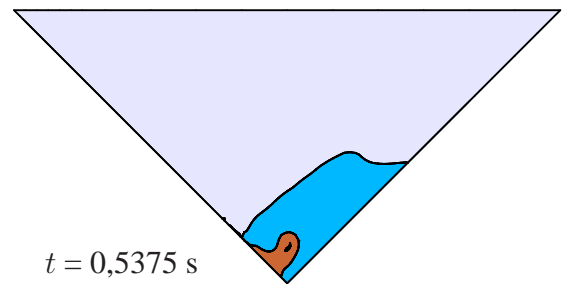
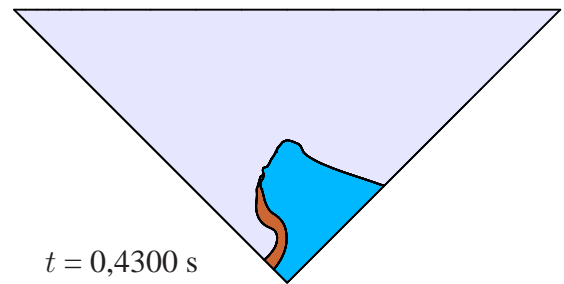
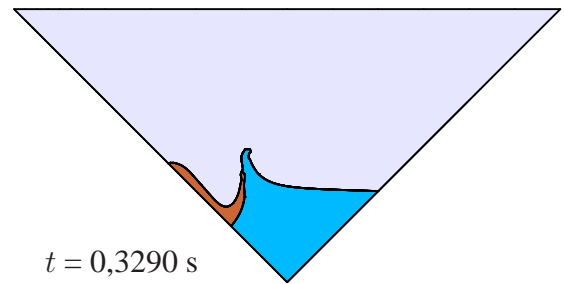
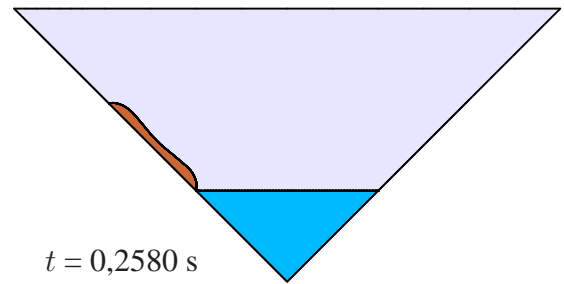


Bild 7.12: Eintauchphase des Modellhanges in ein Gewässer für die Parametersätze 2 und 4.

Die Ergebnisse der Simulationen für die Parametersätze 2 und 4 sind in Bild 7.12 für verschiedene Zeitpunkte vergleichend gegenübergestellt. Beim Auftreffen der Rutschfront auf das darunter befindliche Gewässer wird das Bodensegment aufgrund der als reibungsbehaftet modellierten Grenzfläche abrupt abgebremst und ändert die Bewegungsrichtung. Da die Modellannahme inkompressiblen Materialverhaltens Kompaktion nicht abbildet, löst das Aneinanderhaften von Bodensegment und Wasser eine zirkulierende Bewegung der Rutschmasse aus, während sich im Wasserkörper eine Welle ausbildet. Im Newton'schen Fluid (Fall 2) treten aufgrund des linearen Stoffgesetzes und der hohen Viskosität lediglich moderate Verformungen während der Eintauchphase auf. Das Material bleibt relativ kompakt, wodurch sich die Strömung an der Schulter des Rutsches ablöst und in Form eines Eintauchkraters nach innen kollabiert. Danach bilden sich Lufteinschlüsse im Wasserkörper, die teilweise mit dem zurückströmenden Wasser entlang der Böschung an die Wasseroberfläche transportiert werden. Im Falle des Herschel-Bulkley-Fluids (Fall 4) treten aufgrund der Zirkulationsbewegung ausgeprägte Scherraten im Bodenmaterial auf, die eine Verringerung der Viskosität zur Folge haben. Entsprechend sind während des Eintauchvorganges signifikante Verformungen zu beobachten, die ein Aneinanderhaften beider Fluide und damit die Transformation eines Großteils kinetischer Rutschenergie in Wellenenergie ermöglichen. Lufteinschlüsse treten lediglich im Bodenmaterial auf. Das zurückströmende Gewässer transportiert einen Teil des Bodenmaterials entlang der Böschung zurück.

Im Allgemeinen bewegen und verformen sich die Grenzflächen zwischen den betrachteten Phasen während des gesamten Eintauchvorganges und erfahren währenddessen ausgeprägte Struktur- und Gestaltänderungen. Die Level-Set-Formulierung des Grenzflächentransportes ist dabei in der Lage, die Effekte bei Vereinigung und Trennung von Teilgebieten sehr gut abzubilden. Auch die in diesem Beispiel interessierende Auflaufhöhe der Welle auf der dem Rutsch gegenüberliegenden rechten Behälterseite ist gut abgebildet und für die beiden betrachteten Fälle in Bild 7.13 vergleichend gegenübergestellt.

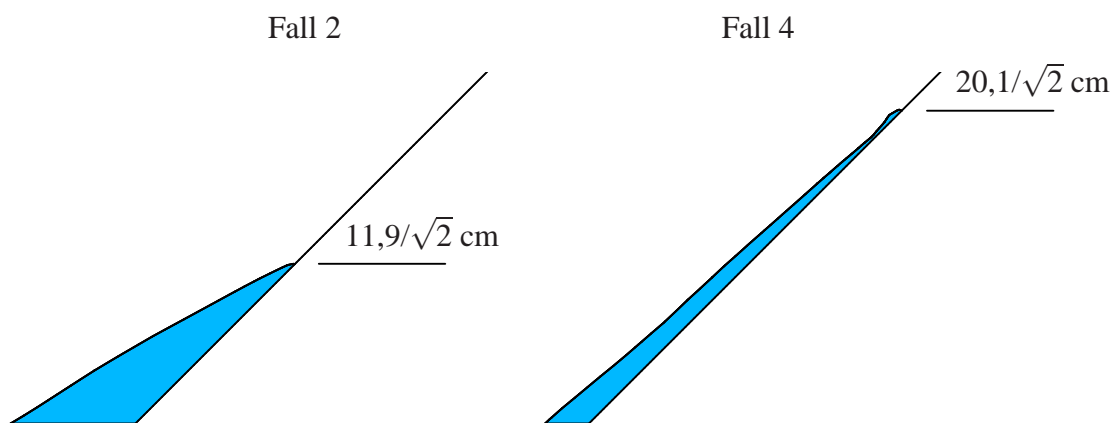


Bild 7.13: Auflaufhöhe an rechter Behälterseite für die Parametersätze 2 und 4.

Die größte Auflaufhöhe für das als Newton'sches Fluid modellierte Bodensegment im Fall 2 beträgt $11,9/\sqrt{2} \text{ cm}$ über dem ursprünglichen Gewässerspiegel und damit 59,5 % der initialen Gewässertiefe. Für den Fall 4 des als Herschel-Bulkley-Fluid beschriebenen Bodensegmentes ist die maximale Auflaufhöhe $20,1/\sqrt{2} \text{ cm}$ und damit 100,5 % der initialen Gewässertiefe und entsprechend etwas mehr als 1,68 mal der Auflaufhöhe im Fall 2. Der Unterschied in den Auflaufhöhen ist trotz annähernd gleicher Materialdichten signifikant und verdeutlicht den

Einfluss der Materialmodellierung auf die Erfassung der betrachteten physikalischen Vorgänge. Die abnehmende Viskosität des Herschel-Bulkley-Fluids bei hohen Scherraten sowie die als reibungsbehaftet modellierte Grenzfläche zwischen Bodenmaterial und Wasser ermöglichen die Transformation eines Großteils kinetischer Rutschenergie in Wellenenergie und entsprechend hohe Auflauhöhen. Aufgrund der Modellannahmen von Haftreibung zwischen den Fluiden sowie zunächst unberücksichtigter Reibung zwischen Bodenmaterial und Rutschrampe ist die Energiedissipation bei realen Rutschereignissen größer als in der Simulation, mit der als Folge größere Auflauhöhen als bei realen Ereignissen errechnet werden. Entsprechend ist das vorgestellte Modell mit geeigneten topographischen und Materialdaten gefährdeter Gebiete dazu geeignet, zur Planung von Schutzverbauungen wie Sperrbauwerken oder Schutzdämmen eingesetzt zu werden.

Abschließend ist die Massenerhaltung der Parametersätze 2 und 4 analysiert. Der relative Massefehler ist mit (7.10) ausgewertet und für alle Materialien in Bild 7.14 dargestellt.

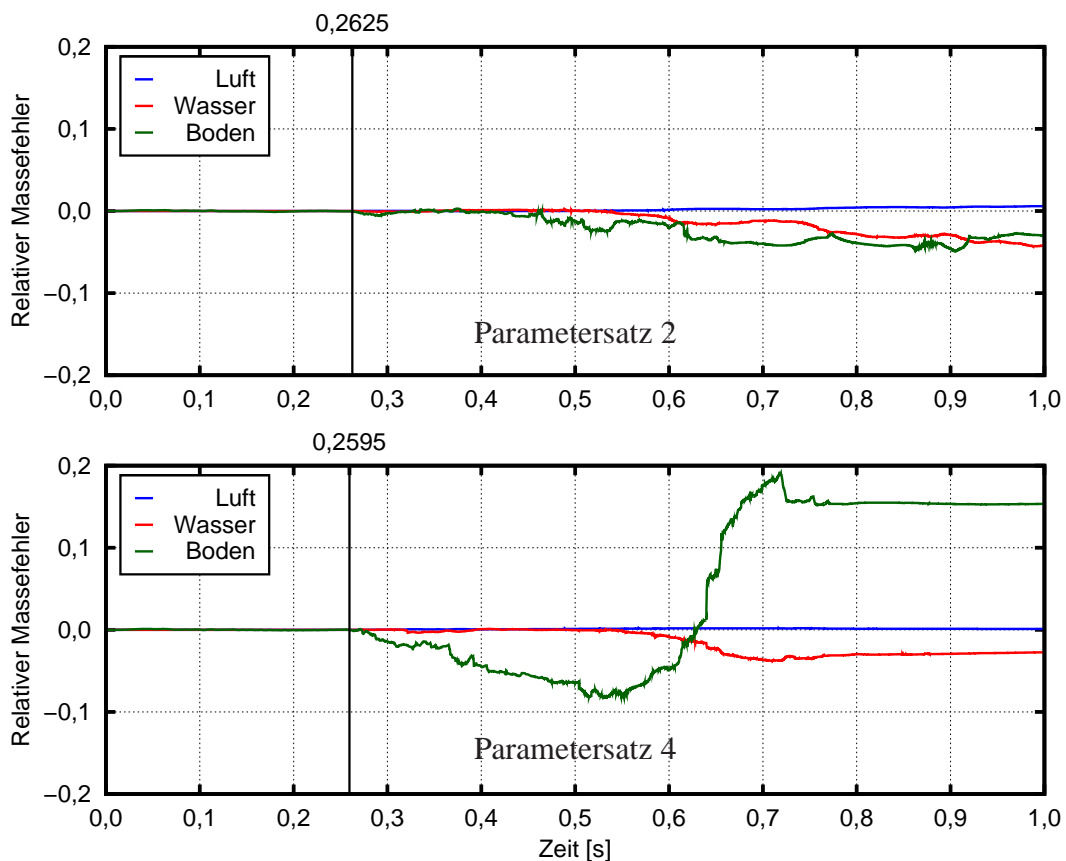


Bild 7.14: Entwicklung des relativen Massefehlers der Parametersätze 2 und 4 im Zeitintervall.

Vor dem Aufprall des Bodenmaterials auf den Wasserkörper sind die relativen Massefehler sehr klein. Die Massenabweichung des Bodenmaterials in diesem Zeitbereich beträgt ca. 0.11 % für Parametersatz 2 und ca. 0.12 % für Parametersatz 4, während der relative Massenfehler der anderen Phasen bedeutend kleiner ist. Damit zeigt das Verfahren eine sehr gute Massenerhaltung in diesem Zeitbereich, was sowohl in der massenerhaltenden Reinitialisierung begründet ist, als auch in der Tatsache, dass keine Gebietsvereinigungen oder -trennungen auftreten. Nach dem Auftreffen des Bodenmaterials auf den Wasserkörper (gekennzeichnet durch vertikale Geraden

in Bild 7.14) verändert sich die Situation jedoch deutlich. Zum einen treten Tripelpunkte auf, deren kontinuierliche Erhaltung (siehe Abschnitt 7.1.3) Massenfehler bewirkt, und zum anderen führen Struktur- und Gestaltänderungen aller drei Phasen zu weiteren Volumenabweichungen. Für Parametersatz 2 beträgt die Massenabweichung aller Phasen dennoch weniger als 5 % im betrachteten Zeitintervall. Für Parametersatz 4 ist die Entwicklung des relativen Massefehlers des Bodenmaterials ungewöhnlich, da die Masse nach dem Aufprall um ca. 8.5 % abnimmt und danach wieder zunimmt, bis es den 1,19-fachen Wert der ursprünglichen Masse erreicht. Entsprechend werden die Ursachen der Entwicklung des Massefehlers näher beleuchtet.

Nach dem Aufprall des Bodenmaterials auf den Wasserkörper verformt sich die Rutschfront, wobei die Scherraten ansteigen und die Viskosität aufgrund des Herschel-Bulkley-Modells abnimmt. Die Haftreibungsbedingungen an der Grenzfläche führen dazu, dass sich ein Film von Bodenmaterial an der Wasseroberfläche ausbildet. Dieser wird mit der sich verformenden Grenzfläche in die Länge gezogen, bis er sehr dünn ist und unterhalb der Größenordnung der Diskretisierung verschwindet, wie das Detail in Bild 7.15 a) verdeutlicht. Ein Großteil des Massenverlustes kurz nach dem Aufprall ist durch diesen Effekt bedingt. Die anschließende Zunahme der Bodenmasse ist in Materialeinschlüssen im Bodenkörper begründet, die während der Bewegung des Materials in die Länge gezogen werden und infolge unzureichender Feinheit der Diskretisierung verschwinden, siehe Bild 7.15 b).

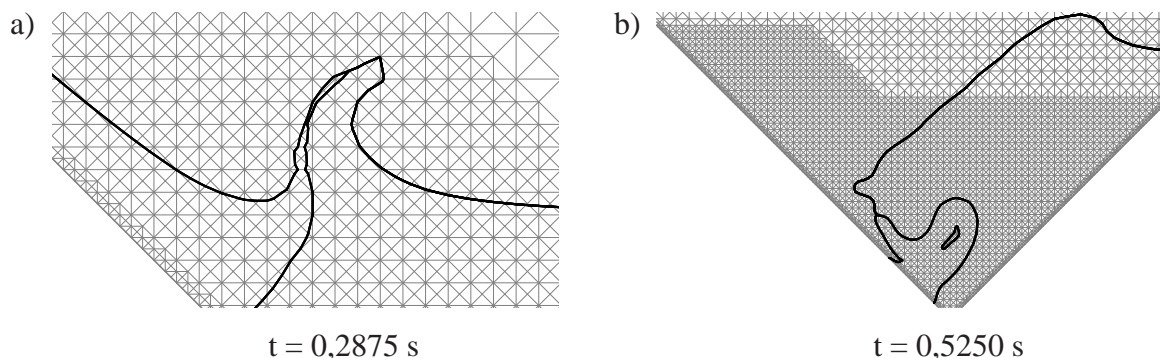


Bild 7.15: Masseverlust und -zunahme im Bodenkörper bei Berechnung mit Parametersatz 4.

Damit bleibt festzuhalten, dass trotz der schon recht fein gewählten Diskretisierung in den relevanten Bereichen immer noch Situationen auftreten können, in denen die Feinheit der Diskretisierung nicht ausreicht. Die Verwendung geeigneter Netzverfeinerungs- oder -bewegungsstrategien ist eine Möglichkeit, bewegte Grenzflächen mit signifikanten Struktur- und Gestaltänderungen der voneinander getrennten Gebiete besser zu erfassen und somit die Massenerhaltung zu verbessern.

8. Zusammenfassung

Gravitative Massenbewegungen schnell rutschender Bodenmaterialien stellen aufgrund ihres meist unerwarteten Auftretens in vielen Regionen der Erde eine bedeutende Naturgefahr für Menschenleben und Sachwerte dar. Neben der offensichtlichen Gefährdung in Berg- und Vulkanregionen sind jedoch auch Küstenregionen in der Nähe von Flussdeltas oder an Kontinentalthängen betroffen, denn das Auftreten submariner Rutschungen kann zu örtlich begrenzten Tsunamis in den betroffenen Regionen führen. Darüber hinaus können Erdbebentsunamis durch gleichzeitig ausgelöste submarine Hangrutschungen verstärkt werden. Oftmals resultiert die Ursache gravitativer Bodenbewegungen auch aus nachhaltigen menschlichen Eingriffen in natürliche Geosysteme. Neben Straßeneinschnitten, Flussbegradigungen, Abholzung von Baumbeständen oder dem Anlegen von Stauseen ist gerade in Entwicklungsländern aufgrund der Bevölkerungsentwicklung und der ökonomischen Nutzbarmachung zahlreicher Naturlandschaften davon auszugehen, dass zunehmend neue rutschgefährdete Gebiete entstehen und besiedelt werden. Die Auswirkungen des Klimawandels tragen zu einer Verschärfung der Situation bei, denn neben der Zunahme schwerer Unwetter und langanhaltender Regenfälle wird auch das Auftauen von Permafrostböden in Hochgebirgsregionen oder von stabilisierenden Methanhydraten in unterseeischen Kontinentalthängen zur Zunahme signifikanter Rutschereignisse führen.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Formulierung und numerische Umsetzung eines einheitlichen Modells zur Beschreibung rutschender granularer Bodenmaterialien und umgebender fluiden Medien im Rahmen oberflächengekoppelter Mehrfeldsysteme. Wesentliche Annahme der Modellierung ist dabei die hinreichende Homogenität der interagierenden Medien auf Makroskalen, so dass die Kontinuumsmechanik angewendet werden kann. Weiterhin gilt die Annahme, dass die gemeinsamen Grenzflächen der oberflächengekoppelten Teilkontinua keine räumliche Ausdehnung in Grenzflächennormalenrichtung besitzen. Die Beschreibung der betrachteten Prozesse erfolgt mit den stoffunabhängigen Gleichungen der Kinematik sowie den Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Drehimpuls. Dafür ist aufgrund großer Deformationen rutschender Böden die Euler'sche Betrachtungsweise gewählt. Das Materialverhalten der anstehenden Fluide Luft und Wasser ist als inkompressibel angenommen und mit linear-viskosen Newton'schen Fluidmodellen erfasst. Für die Beschreibung granularer Bodenmaterialien sind verschiedene Formulierungen getestet. Auf Grundlage einer Fluidformulierung ist der fließende Boden als inkompressibles viskoplastisches Herschel-Bulkley-Fluid modelliert und auf Grundlage einer Feststoffformulierung als kompressibles elasto-viskoplastisches Material mit modifizierter Drucker-Prager-Fließbedingung. Die Erfassung der Bewegung von Teilkontinua-Grenzflächen ist mit der Euler'schen Betrachtungsweise nicht auf direktem Wege möglich. Dieses Defizit ist hier unter Zuhilfenahme vorzeichenbehafteter Abstandsfunktionen mit der Level-Set-Methodik umgangen. Damit ergeben sich Vorteile bei der Erfassung signifikanter Gestalt- und Topologieänderungen von Teilkontinua und Grenzflächen sowie bei der Ermittlung von

Grenzflächengeometrieinformationen. Die Notwendigkeit der Reinitialisierung von Abstandsfunktionen im Rahmen der betrachteten instationären Prozesse hingegen ist als negativ zu bewerten.

Die in die jeweiligen schwachen Formen überführten Modellgleichungen für Physik und Grenzflächenbewegung sind mit der Raum-Zeit-Finite-Element-Methode numerisch gelöst. Dafür ist das betrachtete Raum-Zeit-Gebiet in sequentiell zu diskretisierende und zu berechnende Raum-Zeit-Scheiben unterteilt. Die Zustandsgrößen sind an Zeitscheibenübergängen mit zeitdiskontinuierlichen Galerkin-Verfahren in integraler Form verknüpft, so dass mit den dort auftretenden Variablensprüngen ein implizites Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung entsteht. Petrov-Galerkin-Stabilisierungen sichern glatte Lösungen des Verfahrens, auch bei Konvektionsdominanz oder Ansatzgleichheit im Rahmen gemischter Formulierungen. Die linearisierten gekoppelten Modellgleichungen für Physik und Grenzflächenbewegung werden im Rahmen äußerer Picard-Iterationen gelöst, bis auskonvergierte Lösungen aller Gleichungen einer Raum-Zeit-Scheibe vorliegen. Mit grenzflächenseitig unterschiedlichen Materialien sowie aufgabenspezifisch zu berücksichtigenden Grenzflächenquelltermen treten grenzflächenunstetige Lösungsverläufe in Form von starken und schwachen Diskontinuitäten auf. Zu deren Erfassung sind die Ansatzräume grenzflächenbeherbergender Elemente um diskontinuierliche Ansätze erweitert. Die Konstruktion der dafür verwendeten Anreicherungen ist im Allgemeinen mit Signumfunktionen der Level-Set-Lösung realisiert. Starke Unstetigkeiten sind so in natürlicher Weise erfasst, während schwach unstetige Lösungsverläufe mit Nitsche's Methode bzw. der lokal gemischt-hybriden Methode erzwungen werden. In beiden Fällen erfolgt die Kopplung grenzflächenseitiger Beschreibungsvariablen ohne Verwendung zusätzlicher Freiwerte. Dafür ist jedoch ein Penalty-Term mit heuristisch gewähltem Penalty-Faktor zu verwenden.

Ausgewählte akademische Beispiele dienen der Verifikation der eingesetzten Submodelle, zeigen jedoch auch deren Grenzen und damit Verbesserungsmöglichkeiten auf. So kann z. B. gezeigt werden, dass Grenzflächengeometrieeigenschaften bei exakten Werten von Abstandsfunktionen äußerst präzise ermittelt werden können, die Genauigkeit bei reinitialisierter Lösung jedoch stark abfällt. Dennoch sind die Oberflächenbewegungen einer Kapillarwelle mit krümmungsabhängigen Drucksprüngen sehr gut erfasst, wie der Vergleich mit Literaturwerten belegt. Die Ermittlung schwach unstetiger Lösungen ist anhand des Geschwindigkeitsfeldes der Schichtenströmung zweier Fluide untersucht. Dabei zeigt sich, dass Genauigkeit und Konvergenzverhalten der hier verwendeten Techniken mit etablierten Ansätzen aus der Literatur übereinstimmen. Die Modellierung von Bodenmaterialien auf Grundlage elasto-viskoplastischer Feststoffformulierungen mit modifizierter Drucker-Prager-Fließbedingung ist anhand des Bodenumlagerungsverhaltens bei verschiedenen inneren Reibungswinkeln gezeigt. Fließende Bodenmaterialien sind als viskoplastische Herschel-Bulkley-Fluide beschrieben. Die grundsätzlichen Möglichkeiten des darauf gründenden Gesamtmodells sind anhand der Rutschung verschiedener Modellhänge in Interaktion mit den anstehenden Fluiden Luft und Wasser bei der Entstehung von Impulswellen demonstriert. Ein sich verformendes, bereits kinematisches Hangsegment rutscht infolge Erdbeschleunigung in ein darunter liegendes Gewässer und löst Wasserwellen aus. Dabei ist gezeigt, dass die Auflaufhöhe der Welle auf der gegenüberliegenden Seite maßgeblich von den gewählten Materialparametern des Bodenmaterials abhängt.

Literatur

- [1] S. Abadie, D. Morichon, S. T. Grilli & S. Glockner: *VOF/Navier-Stokes numerical modeling of surface waves generated by subaerial landslides*. La Houille Blanche, 1, 21–26, 2008.
- [2] D. Adalsteinsson & J. A. Sethian: *A fast level set method for propagating interfaces*. J. Comp. Phys., 118, 269–277, 1995.
- [3] D. Adalsteinsson & J. A. Sethian: *The fast construction of extension velocities in level set methods*. J. Comp. Phys., 148, 9–22, 1999.
- [4] J. Altenbach & H. Altenbach: *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. B. G. Teubner Verlag, Stuttgart, 1994.
- [5] J. E. Andrade, C. F. Avila, S. A. Hall, N. Lenoir & G. Viggiani: *Multiscale modeling and characterization of granular matter: From grain kinematics to continuum mechanics*. JMPSs, 59, 237–250, 2011.
- [6] D. N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn & D. Marini: *Discontinuous Galerkin methods for elliptic problems*. In B. Cockburn, G. E. Karniadakis & C.-W. Shu, editors, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, volume 11, Discontinuous Galerkin Methods. Theory, Computation and Applications, pages 89–101. Springer Verlag, 2000.
- [7] S. Assier Rządkiwicz, C. Mariotti & P. Heinrich: *Numerical simulation of submarine landslides and their hydraulic effects*. J. Watrwy., Port, Coast., Ocean Engrg., 123, 149–157, 1997.
- [8] B. Ataie-Ashtiani & G. Shobeyri: *Numerical simulation of landslide impulsive waves by incompressible smoothed particle hydrodynamics*. Int. J. Numer. Meth. Fl., 56, 209–232, 2008.
- [9] R. F. Ausas, E. A. Dari & G. C. Buscaglia: *A geometric mass-preserving redistancing scheme for the level set function*. Int. J. Numer. Meth. Fl., 65, 989–1010, 2011.
- [10] I. Babuška: *Error-bounds for finite element method*. Num. Math., 16, 322–333, 1971.
- [11] I. Babuška: *The finite element method with penalty*. Math. Comp., 27, 221–228, 1973.
- [12] N. Bakhvalov & G. Panasenko: *Homogenization: Averaging processes in periodic media. Mathematical problems in the mechanics of composite materials*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1. Edition, 1989.

- [13] G. Barla & M. Barla: *Investigation and modelling of the Brenva Glacier rock avalanche on the Mount Blanc Range*. In Proc. Eurock 2001, pages 35–40, Espoo, Finland, 2001.
- [14] T. Belytschko & T. Black: *Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 45, 601–620, 1999.
- [15] T. Belytschko & R. Gracie: *On XFEM applications to dislocations and interfaces*. Int. J. Plast., 23, 1721–1738, 2007.
- [16] T. Belytschko, R. Gracie & G. Ventura: *A review of extended/generalized finite element methods for material modeling*. Model. Simul. Mater. Sci. Engrg., 17, 043001 (24pp), 2009.
- [17] T. Belytschko, N. Moës, S. Usui & C. Parimi: *Arbitrary discontinuities in finite elements*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 50, 993–1013, 2001.
- [18] N. Bićanić: *Discrete element methods*. In E. Stein, R. de Borst & T. J. R. Hughes, editors, Encyclopedia of Computational Mechanics, volume 1, Fundamentals, chapter 11. Wiley, Chichester, 2007.
- [19] G. Biros, L. Ying & D. Zorin: *An embedded boundary integral solver for the unsteady incompressible Navier-Stokes equations*. Technical Report TR2003-838, Courant Institute, New York University, 2002.
- [20] F. Brezzi: *On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers*. RAIRO Anal. Numér., 8, 129–151, 1974.
- [21] F. Brezzi, L. P. Franca, T. J. R. Hughes & A. Russo: $b = \propto g$. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 145, 329–339, 1997.
- [22] A. N. Brooks & T. J. R. Hughes: *Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 32, 199–259, 1982.
- [23] T. Bugge, R. H. Belderson & N. H. Kenyon: *The storegga slide*. Phil. Trans. R. Soc. A, 325, 357–388, 1988.
- [24] E. Burman: *A penalty-free nonsymmetric Nitsche-type method for the weak imposition of boundary conditions*. SIAM J. Num. Anal., 50, 1958–1981, 2012.
- [25] C. S. Campbell, P. W. Cleary & M. Hopkins: *Large-scale landslides simulations: global deformation, velocities and basal friction*. J. Geophys. Res., 100, 8267–8283, 1995.
- [26] C. L. Chen & C. H. Ling: *Granular-flow rheology: Role of shear-rate number in transition regime*. J. Engrg. Mech., 122, 469–480, 1996.
- [27] S. Chen, B. Merriman, S. Osher & P. Smereka: *A simple level set method for solving Stefan problems*. J. Comp. Phys., 135, 8–29, 1997.

- [28] J. Chessa & T. Belytschko: *An enriched finite element method and level sets for axisymmetric two-phase flow with surface tension*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 58, 2041–2064, 2003.
- [29] J. Chessa & T. Belytschko: *An extended finite element method for two-phase fluids*. J. Appl. Mech., 70, 10–17, 2003.
- [30] J. Chessa, H. Wang & T. Belytschko: *On the construction of blending elements for local partition of unity enriched finite elements*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 57, 1015–1038, 2003.
- [31] D. L. Chopp: *Computing minimal surfaces via level set curvature flow*. J. Comp. Phys., 106, 77–91, 1993.
- [32] P. W. Cleary: *Large scale industrial DEM modelling*. Engrg. Comp., 21, 169–204, 2004.
- [33] A. Dervieux & F. Thomasset: *A finite element method for the simulation of a Rayleigh-Taylor instability*. In Lecture Notes in Mathematics, volume 771, Proc. Appr. Meth. Navier-Stokes Probl., pages 145–158. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [34] A. Dervieux & F. Thomasset: *Multifluid incompressible flows by a finite element method*. In Lecture Notes in Physics, volume 141, Proc. 7th Int. Conf. Num. Meth. Fl. Dyn., pages 158–163. Springer-Verlag, Berlin, 1981.
- [35] Y. Di & R. Li: *Computation of dendritic growth with level set model using a multi-mesh adaptive finite element method*. J. Sci. Comput., 39, 441–453, 2009.
- [36] D. Dinkler & U. Kowalsky: *Phänomenologische Modelle für Werkstoffe des Bauwesens*. Institut für Statik, Technische Universität Braunschweig, 1998.
- [37] J. Dolbow & L. P. Franca: *Residual-free bubbles for embedded Dirichlet problems*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 197, 3751–3759, 2008.
- [38] J. Dolbow & I. Harari: *An efficient finite element method for embedded interface problems*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 78, 229–252, 2009.
- [39] J. E. Dolbow: *An Extended Finite Element Method with Discontinuous Enrichment for Applied Mechanics*. Diss., Northwestern University Chicago, 1999.
- [40] D. C. Drucker & W. Prager: *Soil mechanics and plastic analysis of limit design*. Quart. Appl. Math., 10, 157–165, 1952.
- [41] J. Ebers-Ernst: *Modellierung des inelastischen Verformungsverhaltens von Siedlungsabfalldeponien*. Diss., TU Braunschweig, Institut für Statik, 2001.
- [42] W. Ehlers: *A single-surface yield function for geomaterials*. Arch. Appl. Mech., 65, 246–259, 1995.
- [43] A. Embar, J. Dolbow & I. Harari: *Imposing Dirichlet boundary conditions with Nitsche's method and spline-based finite elements*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 83, 877–898, 2010.

- [44] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger & I. Mitchell: *A hybrid particle level set method for improved interface capturing*. J. Comp. Phys., 183, 83–116, 2002.
- [45] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo & C. Johnson: *Computational differential equations*. Cambridge University Press, Cambridge, 2. Edition, 1996.
- [46] J. H. Ferziger: *Interfacial transfer in Tryggvason's method*. Int. J. Numer. Meth. Fl., 41, 551–560, 2003.
- [47] R. Findeiß: *Ein orts- und zeitadaptives Finite-Element-Verfahren zur Traglastanalyse wassergesättigter Böden*. Diss., TU München, Lehrstuhl für Statik, 2001.
- [48] L. P. Franca & A. Russo: *Deriving upwinding, mass lumping and selective reduced integration by residual-free bubbles*. Appl. Math. Lett., 9, 83–88.
- [49] T.-P. Fries: *A corrected XFEM approximation without problems in blending elements*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 75, 503–532, 2008.
- [50] H. M. Fritz: *Initial phase of landslide generated impulse waves*. Diss., ETH Zürich, Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie, 2002.
- [51] S. Ganesan, G. Matthies & L. Tobiska: *On spurious velocities in incompressible flow problems with interfaces*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 196, 1193–1202, 2007.
- [52] D. Gerlach, G. Tomar, G. Biswas & F. Durst: *Comparison of volume-of-fluid methods for surface tension-dominant two-phase flows*. Int. J. Heat Mass Tran., 49, 740–754, 2006.
- [53] F. Gibou, R. Fedkiw, R. Caffisch & S. Osher: *A level set approach for the numerical simulation of dendritic growth*. J. Sci. Comput., 19, 183–199, 2003.
- [54] D. Glade & R. Dikau: *Gravitative Massenbewegungen - vom Naturereignis zur Naturkatastrophe*. Petermanns Geogr. Mitt., 145, 42–55, 2001.
- [55] J. Glimm, J. W. Grove, X. L. Li, K.-M. Shyue, Y. Zeng & Q. Zhang: *Three-dimensional front tracking*. SIAM J. Sci. Comput., 19, 703–727, 1998.
- [56] R. Gracie, H. Wang & T. Belytschko: *Blending in the extended finite element method by discontinuous galerkin and assumed strain methods*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 74, 1645–1669, 2008.
- [57] S. Groß: *Numerical methods for three-dimensional incompressible two-phase flow problems*. Diss., RWTH Aachen, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, 2008.
- [58] S. Groß & A. Reusken: *An extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows with surface tension*. J. Comp. Phys., 224, 40–58, 2007.
- [59] N. Guo & J. Zhao: *A coupled FEM/DEM approach for hierarchical multiscale modelling of granular media*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 99, 789–818, 2014.
- [60] A. Hansbo & P. Hansbo: *An unfitted finite element method, based on Nitsche's method, for elliptic interface problems*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 191, 5537–5552, 2002.

- [61] A. Hansbo & P. Hansbo: *A finite element method for the simulation of strong and weak discontinuities in solid mechanics*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 193, 3523–3540, 2004.
- [62] F. H. Harlow & J. E. Welch: *Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface*. Phys. Fl., 8, 2182–2189, 1965.
- [63] P. Heinrich, A. Piatanesi & H. Hébert: *Numerical modelling of tsunami generation and propagation from submarine slumps: the 1998 Papua New Guinea event*. Geophys. J. Int., 145, 97–111, 2001.
- [64] M. Herrmann: *A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids*. J. Comp. Phys., 227, 2674–2706, 2008.
- [65] C. W. Hirt, A. A. Amsden & J. L. Cook: *An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds*. J. Comp. Phys., 135, 227–253, 1974.
- [66] C. W. Hirt & B. D. Nichols: *Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries*. J. Comp. Phys., 39, 201–225, 1981.
- [67] T. Y. Hou, J. S. Lowengrub & M. J. Shelley: *Boundary integral methods for multicomponent fluids and multiphase materials*. J. Comp. Phys., 169, 302–362, 2001.
- [68] R. Huang, J. H. Prévost, Z. Y. Huang & Z. Suo: *Channel-cracking of thin films with the extended finite element method*. Engrg. Fract. Mech., 70, 2513–2526, 2003.
- [69] X. Huang & M. H. García: *A Herschel-Bulkley model for mud flow down a slope*. J. Fl. Mech., 374, 305–333, 1998.
- [70] Y. Huang & N. Yi: *The superconvergent cluster recovery method*. J. Sci. Comput., 44, 301–322, 2010.
- [71] B. Hübner: *Simultane Analyse von Bauwerk-Wind-Wechselwirkungen*. Diss., TU Braunschweig, Institut für Statik, 2003.
- [72] T. J. R. Hughes: *Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 127, 387–401, 1995.
- [73] T. J. R. Hughes, L. P. Franca & M. Balestra: *A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. Circumventing the Babuška-Brezzi condition: A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accomodating equal-order interpolations*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 59, 85–99, 1986.
- [74] T. J. R. Hughes, L. P. Franca & M. Hulbert: *A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin / least-squares method for advective-diffusive equations*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 73, 173–189, 1989.
- [75] K. Hutter: *Fluid- und Thermodynamik : eine Einführung*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2. Edition, 2003.

- [76] S. R. Hysing: *A new implicit surface tension implementation for interfacial flows*. Int. J. Numer. Meth. Fl., 51, 659–672, 2006.
- [77] S. R. Hysing: *Numerical simulation of immiscible fluids with FEM level set techniques*. Diss., Universität Dortmund, Institut für Angewandte Mathematik, 2007.
- [78] B. M. Irons & R. C. Tuck: *A version of the Aitken accelerator for computer iteration*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 1, 275–277, 1969.
- [79] R. M. Iverson: *The physics of debris flows*. Rev. Geophys., 35, 245–296, 1997.
- [80] H. Ji & J. E. Dolbow: *On strategies for enforcing interfacial constraints and evaluating jump conditions with the extended finite element method*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 61, 2508–2535, 2004.
- [81] L. Jiang & P. H. LeBlond: *The coupling of a submarine slide and the surface waves which it generates*. J. Geophys. Res., 97, 12731–12744, 1992.
- [82] L. Jiang & P. H. LeBlond: *Numerical modeling of an underwater Bingham plastic mud-slide and the waves which it generates*. J. Geophys. Res., 98, 10303–10317, 1993.
- [83] A. A. Johnson & T. E. Tezduyar: *Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 134, 351–373, 1996.
- [84] G. A. Kiersch: *Vaiont reservoir disaster*. Civ. Engrg., 34, 32–39, 1964.
- [85] A. Kölke: *Modellierung und Diskretisierung bewegter Diskontinuitäten in randgekoppelten Mehrfeldsystemen*. Diss., TU Braunschweig, Institut für Statik, 2005.
- [86] V. Krase: *Stability of municipal solid waste landfills*. Diss., TU Braunschweig, Institut für Statik, 2008.
- [87] Y. Krongauz & T. Belytschko: *EFG approximation with discontinuous derivatives*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 41, 1215–1233, 1998.
- [88] D. Kuhl: *Modellierung und Simulation von Mehrfeldproblemen der Strukturmechanik*. Habil., Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Statik und Dynamik, 2004.
- [89] P. Laborde, J. Pommier, Y. Renard & M. Salaün: *High-order extended finite element method for cracked domains*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 64, 354–381, 2005.
- [90] D. Laigle, P. Lachamp & M. Naaim: *SPH-based numerical investigation of mudflow and other complex fluid flow interactions with structures*. Comp. Geosci., 11, 297–306, 2007.
- [91] A. Legay, H. W. Wang & T. Belytschko: *Strong and weak arbitrary discontinuities in spectral finite elements*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 64, 991–1008, 2005.
- [92] G. Liao, F. Liu, G. C. de La Pena, D. Peng & S. Osher: *Level-set-based deformation methods for adaptive grids*. J. Comp. Phys., 159, 103–122, 2000.

- [93] F. Losasso, F. Gibou & R. Fedkiw: *Simulating water and smoke with an octree data structure*. ACM Trans. Graph. (SIGGRAPH Proc.), 23, 457–462, 2004.
- [94] F. Losasso, T. Shinar, A. Selle & R. Fedkiw: *Multiple interacting liquids*. ACM Trans. Graph. (SIGGRAPH Proc.), 25, 812–819, 2006.
- [95] C. L. Mader: *Modeling the 1958 Lituya Bay mega-tsunami*. Sci. Tsun. Haz., 17, 57–67, 1999.
- [96] C. L. Mader & M. L. Gittings: *Modeling the 1958 Lituya Bay mega-tsunami, II*. Sci. Tsun. Haz., 20, 241–250, 2002.
- [97] E. Marchandise, P. Geuzaine, N. Chevaugeon & J.-F. Remacle: *A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for the computation of bubble dynamics*. J. Comp. Phys., 225, 949–974, 2007.
- [98] C. Mariotti & P. Heinrich: *Modelling of submarine landslides of rock and soil*. Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech., 23, 335–354, 1999.
- [99] A. Masud & T. J. R. Hughes: *A space-time Galerkin / least-squares finite element formulation of the Navier-Stokes equations for moving domain problems*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 146, 91–126, 1997.
- [100] J. M. Melenk & I. Babuška: *The partition of unity finite element method: Basic theory and applications*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 139, 289–314, 1996.
- [101] J. Mergheim: *Computational modeling of strong and weak discontinuities*. Diss., Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Technische Mechanik, 2006.
- [102] R. Merle & J. Dolbow: *Solving thermal and phase change problems with the extended finite element method*. Comp. Mech., 28, 339–350, 2002.
- [103] B. Merriman, J. K. Bence & S. J. Osher: *Motion of multiple junctions: A level set approach*. J. Comp. Phys., 112, 334–363, 1994.
- [104] N. Moës, E. Béchet & M. Tourbier: *Imposing dirichlet boundary conditions in the extended finite element method*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 67, 1641–1669, 2006.
- [105] N. Moës, M. Cloirec, P. Cartaud & J.-F. Remacle: *A computational approach to handle microstructure geometries*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 192, 3163–3177, 2003.
- [106] N. Moës, J. Dolbow & T. Belytschko: *A finite element method for crack growth without remeshing*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 46, 131–150, 1999.
- [107] W. Mulder, S. Osher & J. A. Sethan: *Computing interface motion in compressible gas dynamics*. J. Comp. Phys., 100, 209–228, 1992.
- [108] F. Mut, G. C. Buscaglia & E. A. Dari: *New mass-conserving algorithm for level set redistancing on unstructured meshes*. J. Appl. Mech., 73, 1011–1016, 2006.

- [109] S. Nemat-Nasser & M. Hori: *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*. North-Holland, Amsterdam, 2. Edition, 1998.
- [110] D. Q. Nguyen, R. Fedkiw & H. W. Jensen: *Physically based modeling and animation of fire*. In ACM Trans. Graph. (SIGGRAPH Proc.), volume 29, pages 721–728, 2002.
- [111] V. P. Nguyen, M. Stroeve & L. J. Sluys: *Multiscale continuous and discontinuous modeling of heterogeneous materials: A review on recent developments*. J. Multisc. Model., 3, 229–270, 2011.
- [112] M. Nitka, G. Combe, C. Dascalu & J. Desrues: *Two-scale modeling of granular materials: A DEM-FEM approach*. Gran. Matter, 13, 277–281, 2011.
- [113] J. Nitsche: *Über ein Variationsprinzip zur Lösung von Dirichlet-Problemen bei Verwendung von Teilräumen, die keinen Randbedingungen unterworfen sind*. In Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg, volume 36, pages 9–15, 1971.
- [114] W. F. Noh & P. Woodward: *The SLIC (simple line interface calculation) method*. In Lawrence Livermore Laboratory Report No. UCRL-52111, 1976.
- [115] E. Olsson & G. Kreiss: *A conservative level set method for two phase flow*. J. Comp. Phys., 210, 225–246, 2005.
- [116] S. Osher & J. A. Sethian: *Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations*. J. Comp. Phys., 79, 12–49, 1988.
- [117] T. C. Papanastasiou: *Flow of materials with yield*. J. Rheol., 31, 385–404, 1987.
- [118] N. Parolini: *Computational fluid dynamics for naval engineering problems*. Diss., EPF Lausanne, Institut d’analyse et calcul scientifique, 2004.
- [119] D. Peng, B. Merriman, S. Osher, H. Zhao & M. Kang: *A PDE-based fast local level set method*. J. Comp. Phys., 155, 410–438, 1999.
- [120] D. Perić: *On consistent stress rates in solid mechanics: Computational implications*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 33, 799–817, 1992.
- [121] P. Perzyna: *Fundamental problems in viscoplasticity*. In Rec. Adv. Appl. Mech., volume 9, pages 243–377, 1966.
- [122] E. B. Pitman & L. Le: *A two-fluid model for avalanche and debris flows*. Phil. Trans. R. Soc. A, 363, 1573–1601, 2005.
- [123] S. Popinet: *An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows*. J. Comp. Phys., 228, 5838–5866, 2009.
- [124] S. Popinet & S. Zaleski: *A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 30, 775–793, 1999.
- [125] C. Pozrikidis: *Interfacial dynamics for Stokes flow*. J. Comp. Phys., 169, 250–301, 2001.

- [126] A. Prosperetti: *Motion of two superposed viscous fluids*. Phys. Fl., 24, 1217–1223, 1981.
- [127] M. Quecedo, M. Pastor & M. I. Herreros: *Numerical modelling of impulse wave generated by fast landslides*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 59, 1633–1656, 2004.
- [128] A. B. Rabinovich, R. E. Thomson, E. A. Kulikov, B. D. Bornhold & I. V. Fine: *The landslide-generated tsunami of November 3, 1994 in Skagway Harbor, Alaska: A case study*. Geophys. Res. Lett., 26, 3009–3012, 1999.
- [129] W. J. Rider & D. B. Kothe: *Reconstructing volume tracking*. J. Comp. Phys., 141, 112–152, 1998.
- [130] M. X. Rodriguez-Paz & J. Bonet: *A corrected smooth particle hydrodynamics method for the simulation of debris flows*. Numer. Meth. Part. Diff. Eq., 20, 140–163, 2004.
- [131] S. Ruuth: *A diffusion-generated approach to multiphase motion*. J. Comp. Phys., 145, 166–192, 1998.
- [132] S. B. Savage & K. Hutter: *The motion of a finite mass of granular material down a rough incline*. J. Fl. Mech., 199, 177–215, 1989.
- [133] H. F. Schwaiger & B. Higman: *Lagrangian hydrocode simulations of the 1958 Lituya Bay tsunamigenic rockslide*. Geochem., Geophys., Geosys., 8, 1–7, 2007.
- [134] R. Sedgewick: *Algorithmen*. Addison-Wesley, 2. Edition, 2002.
- [135] J. A. Sethian: *A fast marching level set method for monotonically advancing fronts*. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 93, 1591–1595, 1996.
- [136] J. A. Sethian & A. Vladimirsky: *Fast methods for the Eikonal and related Hamilton-Jacobi equations on unstructured meshes*. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 97, 5699–5703, 2000.
- [137] K. Shibamura & T. Utsunomiya: *Reformulation of XFEM based on PUFEM for solving problem caused by blending elements*. Finite Elem. Anal. Des., 45, 806–816, 2009.
- [138] J. Simo & T. Laursen: *An augmented Lagrangian treatment of contact problems involving friction*. Comp. Struct., 42, 97–116, 1992.
- [139] A. Simone, C. A. Duarte & E. Van der Giessen: *A Generalized Finite Element Method for polycrystals with discontinuous grain boundaries*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 67, 1122–1145, 2006.
- [140] N. Sitar & M. M. MacLaughlin: *Kinematics and discontinuous deformation analysis of landslide movement*. In Proc. 2. Panam. symp. landslides, Rio de Janeiro, Brasilien, 1997.
- [141] K. A. Smith, F. J. Solis & D. L. Chopp: *A projection method for motion of triple junctions by level sets*. Int. Free Bound., 4, 263–276, 2002.

- [142] A. Smolianski: *Numerical Modeling of Two-Fluid Interfacial Flows*. Diss., University of Jyväskylä, Department of Mathematical Information Technology, 2001.
- [143] R. Stark: *Festigkeitslehre, Aufgaben und Lösungen*. Springer Verlag, Wien NewYork, 2006.
- [144] F. L. Stazi, E. Budyn, J. Chessa & T. Belytschko: *An extended finite element method with higher-order elements for curved cracks*. *Comp. Mech.*, 31, 38–48, 2003.
- [145] R. Stenberg: *On some techniques for approximating boundary conditions in the finite element method*. *J. Comp. Appl. Math.*, 63, 139–148, 1995.
- [146] M. Stolarska, D. L. Chopp, N. Moës & T. Belytschko: *Modelling crack growth by level sets in the extended finite element method*. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 51, 943–960, 2001.
- [147] J. Strain: *Fast tree-based redistancing for level set computations*. *J. Comp. Phys.*, 152, 664–686, 1999.
- [148] N. Sukumar, D. L. Chopp, N. Moës & T. Belytschko: *Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method*. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 190, 6183–6200, 2001.
- [149] N. Sukumar, D. L. Chopp & B. Moran: *Extended finite element method and fast marching method for three-dimensional fatigue crack propagation*. *Engrg. Fract. Mech.*, 70, 29–48, 2003.
- [150] M. Sussman & E. Fatemi: *An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow*. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20, 1165–1191, 1999.
- [151] M. Sussman & E. G. Puckett: *A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows*. *J. Comp. Phys.*, 162, 301–337, 2000.
- [152] M. Sussman, P. Smereka & S. Osher: *A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow*. *J. Comp. Phys.*, 114, 146–159, 1994.
- [153] H.-Z. Tang, T. Tang & P. Zhang: *An adaptive mesh redistribution method for nonlinear Hamilton-Jacobi equations in two- and three-dimensions*. *J. Comp. Phys.*, 188, 543–572, 2003.
- [154] T. E. Tezduyar, M. Behr, S. Mittal & J. Liou: *A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—the DSD/ST procedure: II. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders*. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 94, 353–371, 1992.
- [155] T. E. Tezduyar & Y. Osawa: *Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors*. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 190, 411–430, 2000.

- [156] E. Thompson: *Use of pseudo-concentrations to follow creeping viscous flows during transient analysis*. Int. J. Numer. Meth. Fl., 6, 749–761, 1986.
- [157] P. Tommasi, P. Campedel, C. Consorti & R. Ribacchi: *A discontinuous approach to the numerical modelling of rock avalanches*. Rock Mech. Rock Engrg., 41, 37–58, 2008.
- [158] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas & Y.-J. Jan: *A front-tracking method for the computations of multiphase flow*. J. Comp. Phys., 169, 708–759, 2001.
- [159] S. P. van der Pijl, A. Segal, C. Vuik & P. Wesseling: *A mass-conserving level-set method for modelling of multi-phase flows*. Int. J. Numer. Meth. Fl., 47, 339–361, 2005.
- [160] E. Walhorn: *Ein simultanes Berechnungsverfahren für Fluid-Struktur-Wechselwirkungen mit finiten Raum-Zeit-Elementen*. Diss., TU Braunschweig, Institut für Statik, 2002.
- [161] C. Winkelmann: *Interior penalty finite element approximation of Navier-Stokes equations and application to free surface flows*. Diss., EPF Lausanne, Institut d’analyse et calcul scientifique, 2007.
- [162] G. X. Wu, R. Eatock Taylor & D. M. Greaves: *The effect of viscosity on the transient free-surface waves in a two-dimensional tank*. J. Engrg. Math., 40, 77–90, 2001.
- [163] J.-H. Wu, J.-S. Lin & C.-S. Chen: *Dynamic discrete analysis of an earthquake-induced large-scale landslide*. Int. J. Rock Mech. Min. Sci., 46, 397–407, 2009.
- [164] Z. Zhang: *Polynomial preserving recovery for anisotropic and irregular grids*. J. Comp. Math., 22, 331–340, 2004.
- [165] O. C. Zienkiewicz & R. L. Taylor: *The Finite Element Method. Volume 1: The Basis. Volume 2: Solid Mechanics. Volume 3: Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000.
- [166] O. C. Zienkiewicz & J. Z. Zhu: *The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 1: The recovery technique*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 33, 1331–1364, 1992.
- [167] A. Zilian & T.-P. Fries: *A localized mixed-hybrid method for imposing interfacial constraints in the extended finite element method (XFEM)*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 79, 733–752, 2009.
- [168] A. Zilian & A. Legay: *The enriched space-time finite element method (EST) for simultaneous solution of fluid-structure interaction*. Int. J. Num. Meth. Engrg., 75, 305–334, 2008.
- [169] S. Zlotnik & P. Díez: *Hierarchical X-FEM for n-phase flow ($n > 2$)*. Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg., 198, 2329–2338, 2009.

Berichte aus dem Institut für Statik ab 2003

Nr.	2003-96	B. HÜBNER: Simultane Analyse von Bauwerk-Wind-Wechselwirkungen
Nr.	2003-97	J. GEISTEFELDT: Stochastische Finite-Element-Methoden mit Anwendung auf aeroelastische Tragsysteme
Nr.	2003-98	O. KNOKE: Beulwiderstände zusammengesetzter Zylinder-Kegel-Schalen
Nr.	2005-99	A. KÖLKE: Modellierung und Diskretisierung bewegter Diskontinuitäten in randgekoppelten Mehrfeldsystemen
Nr.	2006-100	D. DINKLER (HRSG.): Institut für Statik, Lehre und Forschung, 1996-2006
Nr.	2006-101	A. VEHRE: Ein Reduktionsverfahren für Fluid-Struktur-Wechselwirkung mit Finiten Raum-Zeit-Elementen
Nr.	2006-102	M. LÖHR: Analyse aeroelastischer Systeme mit Spektralen Stochastischen Finite-Element-Methoden
Nr.	2006-103	L. ASCHENBRENNER: Mehrkomponenten-Modell zur Beschreibung des Deformationsverhaltens von Asphalt
Nr.	2006-104	T. ZÜMENDORF: Ein gradientenabhängiges Modell für Schädigung bei viskoplastischem Materialverhalten
Nr.	2007-105	C. LEPPERT: Mehrphasenmodell für granulare Medien zur numerischen Untersuchung des Phasenübergangs bei der Entleerung von Silos
Nr.	2007-106	V. KRASE: Stability of Municipal Solid Waste Landfills
Nr.	2007-107	J. PONTOW: Imperfektionsempfindlichkeit und Grenzlaster von Schalentragerwerken
Nr.	2009-108	M. BECKMANN: Ein gradientenabhängiges Modell für anisotrope Schädigung von Beton unter Berücksichtigung von Porendruck
Nr.	2010-109	P. SUN: Fluid-Struktur-Wechselwirkung mit aktiver Schwingungskontrolle durch piezoelektrische Materialien
Nr.	2010-110	J. VELDE: 3D Nonlocal Damage Modeling for Steel Structures under Earthquake Loading
Nr.	2010-111	K. SCHUSTER: Systemidentifikation und Bauwerksüberwachung mit piezokeramischen Aktuatoren
Nr.	2011-112	S. BENTE: Interaction of Degradation, Deformation and Transport Processes in Municipal Solid Waste Landfills
Nr.	2011-113	L. OSTERMANN: Hochtemperaturverhalten von Beton – Gekoppelte Mehrfeld-Modellierung und numerische Analyse
Nr.	2012-114	B. BRODERSEN: Modellierung des thermo-mechanischen Verbundverhaltens von Asphalt in Straßenaufbauten
Nr.	2012-115	J. KINDLEIN: Gekoppelte Analyse von Reaktions- und Transportprozessen in Deponiestrukturen

Sonderdrucke

Phänomenologische Modelle für Werkstoffe des Bauwesens.

Hermann Ahrens zum 60. Geburtstag (1998).

Herausgeber: D. Dinkler, U. Kowalsky.

Baustatik-Baupraxis 8.

Berichte der Fachtagung am 21. und 22. März 2002 in Braunschweig.

Herausgeber: D. Dinkler.

Institut für Statik, Technische Universität Braunschweig
Beethovenstraße 51, 38106 Braunschweig, Deutschland
Telefon +49 (0)531 / 391-3667, Telefax +49 (0)531 / 391-8116
E-Mail statik@tu-bs.de, Homepage <http://www.statik.tu-bs.de>